

Untersuchungen zur Durchströmung, Beladung und Regeneration eines Diesel-Partikelfilters

Von der Fakultät Energie-, Verfahrens- und Biotechnik
der Universität Stuttgart
zur
Erlangung der Würde eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Tobias Höffken

aus Bergisch Gladbach

Hauptberichter:	Prof. Dr.-Ing. habil. Steffen Schütz
Mitberichter:	Prof. Dr.-Ing. habil. Günter Baumbach
Tag der mündlichen Prüfung:	28. September 2009

Institut für Mechanische Verfahrenstechnik
2010

Danksagung

Durch das Doktorandenprogramm der Robert Bosch GmbH wurde mir die ausschließliche Beschäftigung mit meinem Dissertationsthema ermöglicht. Für die Initiierung und die fortwährende Unterstützung der Arbeit möchte ich allen Vorgesetzten, insbesondere aber Dr. Ralf Wirth herzlich danken. Für die hervorragende fachliche Betreuung bin ich Dr. Björn Janetzky, Dr. Carsten Becker und ganz besonders Dr. Burkhard Michaelis zu großem Dank verpflichtet. Für tatkräftige Unterstützung oder inhaltliche Impulse geht mein Dank an die Kollegen Rainer Peck, Thorsten Heidinger, Christian Schiller, Sibylle Wahl und Gerd Teike. Im Rahmen dieser Arbeit habe ich zwei Diplomanden und einen Praktikanten betreut, die mit überdurchschnittlichem Engagement wertvolle Beiträge geleistet haben. Daher geht mein Dank an Sven Bausewein, Arda Karluvali und Stefan Meili. Für die gute Zusammenarbeit möchte ich mich auch bei Timo Deuschle vom Institut für Mechanische Verfahrenstechnik (IMVT) bedanken.

Prof. Dr.-Ing. Piesche und Prof. Dr.-Ing. habil. Steffen Schütz gilt mein herzlicher Dank für die wissenschaftliche Betreuung meiner Arbeit. Für die Übernahme des Mitberichts bedanke ich mich bei Prof. Dr.-Ing. Günter Baumbach.

Die wichtigste Unterstützung wurde mir durch meine Frau Isabelle gegeben. Für ihren fortwährenden, liebevollen Rückhalt bin ich sehr dankbar.

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis	ix
Zusammenfassung	xiii
Summary	xvii
1 Einführung und Zielsetzung der Arbeit	1
1.1 PKW-Abgase und Abgasnachbehandlung	1
1.1.1 Partikel	1
1.1.2 Abgasprüfung	4
1.2 Diesel-Partikelfilter	4
1.2.1 Belastungszyklen	4
1.2.2 Technische Ausführung	9
1.2.3 Modellierung von Diesel-Partikelfiltern in der Literatur . . .	12
1.3 Zielsetzung der Arbeit	15
2 Strömungsanalyse des Sintermetallfilters	16
2.1 Modellierung	16
2.1.1 Rechengebiet	16
2.1.2 Randbedingungen	17
2.1.3 Impulsbilanz im Filtermedium	17
2.1.4 Beeinflussung der Turbulenz durch das Filtermedium	18
2.1.5 Rechengitter	21
2.2 Experimentelle Untersuchungen	23
2.2.1 Experimenteller Aufbau und Durchführung der Experimente	23
2.2.2 Messung der Geschwindigkeit	27
2.2.3 Messung des Gesamtdruckverlusts	28
2.2.4 Wanddruckmessungen	28
2.3 Simulation	30
2.3.1 Experimentelle Validierung des Strömungsmodells	30
2.3.2 Berechnung des Strömungsfelds in der realen Filtergeometrie	34

2.4	Diskussion	36
3	Numerische Berechnung des Rußschichtaufbaus im Sintermetallfilter	37
3.1	Modellierung	37
3.1.1	Charakterisierung von Rußpartikeln	37
3.1.2	Partikeltransport	40
3.1.3	Aufbau der Rußschicht	42
3.1.4	Strömungswiderstand der Rußschicht	43
3.2	Berechnung des Rußschichtaufbaus auf einer Filtertasche	44
3.3	Diskussion	48
4	Experimentelle Untersuchung und Modellierung der Ruß-Abbrandrate	50
4.1	Modellierung der Abbrandkinetik der Rußschicht	50
4.1.1	Reaktionssystem	50
4.1.2	Reaktionsmechanismus und Reaktionsrate	51
4.2	Experimentelle Bestimmung der Parameter des Kinetikmodells	53
4.2.1	Experimenteller Aufbau und Versuchsdurchführung	54
4.2.2	Ergebnisse	60
4.3	Modellierung der Stofftransporthemmung der Reaktion	67
4.3.1	Überprüfung auf innere Stofftransporthemmung	70
4.3.2	Vereinfachte Modellierung der äußeren Stofftransporthemmung	74
4.4	Diskussion	76
5	Numerische Berechnung des Abbrands der Rußschicht	77
5.1	Modellierung	77
5.1.1	Formulierung der Quellterme des Rußabbrandmodells	77
5.1.2	Strömungswiderstand der Rußschicht beim Abbrand	78
5.2	Simulation	82
5.2.1	Berechnung des Rußabbrands im Versuchsreaktor	83
5.2.2	Berechnung der Regeneration des Sintermetallfilters	91
5.3	Diskussion	96
A	Überprüfung der Turbulenzmodellierung	101
B	Ergänzende Ergebnisse zur Strömungsanalyse des Sintermetallfilters	106
C	Eigenschaften von CAST-Ruß im Vergleich zu Diesel-Ruß	111

D Permeabilitätsmodelle in der Literatur	116
E Untersuchung des Strömungswiderstands der Rußschicht	123
E.1 Modellierung	123
E.2 Experimentelle Untersuchungen	124
E.2.1 Experimenteller Aufbau und Durchführung der Experimente	124
E.2.2 Ergebnisse für variable Filtrationsgeschwindigkeit und variable Partikelgröße	125
E.2.3 Ergebnisse für variable Temperatur	128
Literaturverzeichnis	131

Abkürzungsverzeichnis

Lateinische Symbole und Abkürzungen

A	dimensionsloser Parameter	–
C	Strahlungsaustauschzahl	W/(m ² K)
C_u	Schlupf-Korrekturfaktor, <i>Cunningham</i> -Faktor	–
c	Konzentration	kg/m ³
c	dimensionsloser Parameter	–
\bar{c}	mittlere Molekülgeschwindigkeit	m/s
D	Durchmesser der Einheitszelle	m
d	Durchmesser	m
E_A	Aktivierungsenergie	J/kmol
F	Abweichung, Fehlersumme	–
G	Quellterm, Produktion	kg/(m ³ s ²)
H	Höhe, Dicke	m
H	Enthalpie	J
h	dimensionslose Partikelabmessung aus [50]	–
K	<i>Darcy</i> -Permeabilität	m ²
Kn	<i>Knudsen</i> -Zahl	–
k	Reaktionskoeffizient	1/s
k	turbulente kinetische Energie	m ² /s ²
k_0	Stoßfaktor	1/s
k_B	<i>Boltzmann</i> -Konstante	J/K
k_K	<i>Kozeny</i> -Konstante	–
L	Verhältnis des Widerstands zur <i>Stokes</i> -Kraft	–
ℓ	turbulentes Längenmaß	m
l	charakteristische Länge	m
M	molare Masse	kg/kmol
m	Masse	kg

Abkürzungsverzeichnis

m	Verteilungsdichte aus [50]	–
m''	flächenspezifische Beladung	kg/m ²
\dot{m}	Massenstrom	kg/s
N	Anzahl	–
n	Ordnung der Reaktion in Sauerstoff	–
n''	Flächendichte	1/m ²
\mathbf{n}	Normalenvektor	–
P	dimensionsloser Partialdruck	–
p	Druck	Pa
Q	Wärme	J
q	Ordnung der Reaktion in Ruß aus [108]	–
q_0	Anzahlverteilungsdichte	1/m
q_0^*	logarithmische Anzahlverteilungsdichte	–
R	Radius	m
R_u	Allgemeine Gaskonstante	J/(kmol K)
Re	<i>Reynolds</i> -Zahl	–
r	radiale Ortskoordinate	m
r	spezifische Reaktionsrate	1/s
\mathbf{r}	Ortsvektor	m
St	<i>Stokes</i> -Zahl	–
\mathbf{S}	Vektor der viskosen Verluste	Pa/m
T	Temperatur	K
U	Umfang	m
UDF	benutzerdefinierte Funktion, <i>user-defined function</i>	
UDM	benutzerdefinierter Speicher, <i>user-defined memory</i>	
\dot{V}	Volumenstrom	m ³ /s
\mathbf{v}	Geschwindigkeit	m/s
X	Reaktionsfortschritt	–
x	kartesische Ortskoordinate	m
\mathbf{x}	Ortsvektor	m
Y	Dissipation durch Turbulenz	kg/(m ³ s ²)
Y	Massenanteil	–
y	Abstand zur nächsten Wand	m

y	kartesische Ortskoordinate	m
y_+	dimensionsloser Wandabstand	–
z	kartesische Ortskoordinate	m
z_1	dimensionsloser Parameter	–
z_2	dimensionsloser Parameter	–

Griechische Symbole

α	dimensionsloser Parameter aus [106]	–
β	dimensionsloser Parameter aus [106]	–
γ	dimensionsloser Parameter	–
δ_2	Impulsverlustdicke	m
ε	Emissionskoeffizient	–
ε	Porosität, Hohlvolumenanteil	–
ε	turbulente Dissipationsrate	m^2/s^3
η	Effektivitätsfaktor	–
κ	dimensionsloser Parameter	–
λ	mittlere freie Weglänge	m
μ	dynamische Viskosität	(kg/m s)
ν	kinematische Viskosität	m^2/s
ω	turbulente Wirbelfrequenz	1/s
ρ	Dichte	kg/m^3
σ	Kollisionsdurchmesser der Moleküle	m
σ	<i>Stefan-Boltzmann-Konstante</i>	$\text{W}/(\text{m}^2\text{K}^4)$
σ_g	geometrische Standardabweichung	–
τ	Zeitkonstante, Relaxationszeit	s
τ	Tensor der viskosen Spannungen	N/m^2
Φ	<i>Thiele-Modul</i>	–
ϕ	Abscheidegrad	–
χ	Molenbruch	–
ξ	relativer Durchmesser der Einheitszelle	–
Ω	Verhältnis des Mobilitätsdurchmessers zum maximalen Durchmesser des Agglomerats, Funktion aus [68]	–

Lateinische Indizes

agg	Agglomerat
d	bezogen auf den Durchmesser
eff	effektiv
F	Fluid
h	hydraulisch
K	<i>Kolmogorow</i>
Kn	<i>Knudsen</i>
max	maximal
min	minimal
mol	molar
m	Mobilität
m	massenspezifisch
M	Molekül
P	Partikel
p	Primärpartikel
rel	relativ
SM	Sintermetall, Filtermedium
S	Schüttung
s	an der Oberfläche
T	nach der Temperatur differenziert
W	Wand
y	bezogen auf den Wandabstand

Weitere Symbole und Indizes

—	gemittelt
'''	volumenspezifisch
''	flächenspezifisch
*	logarithmisch
0	Anfangswert, Referenz
1,0	anzahlbezogene, erste Potenz der Verteilung
50,0	anzahlbezogener Median der Verteilung
Δ	Änderung, Unterschied
$m,0$	massenbezogene, erste Potenz der Verteilung
T	transponiert
∇	Nabla-Operator

Zusammenfassung

Aufgrund strenger gesetzlicher Vorgaben müssen Rußpartikel aus dem Abgas moderner Diesel-PKW durch Filtration abgetrennt werden. Durch den Aufbau einer Rußschicht auf der Oberfläche des Filters nimmt der Abgasgegendruck während des Fahrzeugbetriebs zu, so dass dieser in regelmäßigen Abständen durch Abbrand des eingelagerten Rußes regeneriert werden muss. Während des Rußabbrands kann es im Filter zu Temperaturüberhöhungen kommen, die zu dessen Zerstörung führen.

Gegenstand der vorliegenden Dissertation ist ein Diesel-Partikelfilter auf der Basis eines Filtermediums aus Sintermetall, welches durch die Sinterung eines Edelstahlgranulats auf einem Edelstahl-Streckgitter hergestellt wird. Das Sintermetall-Verbundmaterial wird zu keilförmigen Filtertaschen gefaltet, welche ringförmig um eine zentrale Dichtscheibe angeordnet und verschweißt werden. Die Formstabilität der einzelnen Taschen wird durch wellenförmig gefaltete Abstandshalter aus Blech gewährleistet.

Das komplexe Strömungsfeld, die Verteilung des Rußes und der Ablauf der thermischen Regeneration in diesem Filter können durch die in der Literatur vorhandenen Modelle für keramische Wabenfilter nicht beschrieben werden.

Grundlage der Untersuchungen ist das numerische Strömungsmodell einer Einzeltasche des Filters unter Verwendung der Strömungssimulationssoftware *Fluent*. Durch eine Anpassung der Turbulenzmodelle für die Verwendung in Kombination mit porösen Zonen wird die Berechnung der turbulenten Anströmung des Filters ermöglicht. Die Gültigkeit des Strömungsmodells wird durch Abgleich von berechneten Ergebnissen mit Druck- und Geschwindigkeitsmessungen in einem messtechnisch zugänglichen Strömungsexperiment an einer Einzeltasche verifiziert.

Nachteil des entwickelten Modells ist die Größe des numerischen Gitters, welche von der komplexen Bauteilform, aber auch durch die notwendige Auflösung der Grenzschicht an der Oberfläche des porösen Filtermediums erzwungen wird. Das Modell zeigt, dass die Strömungsverteilung auf der Taschenoberfläche wesentlich durch die Form des Abstandshalters beeinflusst wird.

Eine Erweiterung des Strömungsmodells ermöglicht die Simulation des Rußschichtaufbaus auf der Taschenoberfläche. Hierzu wird angenommen, dass zu je-

dem Zeitpunkt die abgeschiedene Rußmenge zur Filtrationsgeschwindigkeit proportional ist, der Ruß also homogen im Abgas verteilt ist. Es wird gezeigt, dass wegen der geringen Größe der Rußteilchen diese Annahme eine zulässige Vereinfachung darstellt.

Die Ergebnisse der Berechnungen zeigen, dass bei geringer Beladung der Filtertasche mit Ruß dieser ungleich auf der Taschenoberfläche verteilt ist. Durch die Strömungsverluste in den Kanälen, welche durch den Abstandhalter im Inneren der Tasche gebildet werden, ist das treibende Druckgefälle im vorderen Bereich der Tasche in einigen Bereichen reduziert. Bei fortschreitender Beladung mit Ruß nimmt diese Ungleichmäßigkeit wegen der Dominanz der Strömungsverluste durch den Strömungswiderstand der Rußschicht ab. Beim voll beladenen Filter ist dann eine weitgehende Gleichverteilung des Rußes gegeben.

Die Ruß-Abbrandrate wird in Abhängigkeit von der Temperatur und des Sauerstoffgehalts des Gases in einem Versuchsreaktor mit reduzierter geometrischer Komplexität in isothermen Abbrandversuchen gemessen. Die isotherme Prozessführung erlaubt die Untersuchung der Änderung der Abbrandrate während des Reaktionsfortschritts. Diese nimmt zu Beginn des Abbrands zu, erreicht bei etwa 75% verbleibender Rußmasse ein Maximum um dann näherungsweise proportional zur Rußmasse abzuklingen. Anhand der Ergebnisse werden ein Kinetikmodell entwickelt und die Modellparameter bestimmt.

Aus der Kombination der Strömungssimulationssoftware, mit der die Komponenten-Erhaltungsgleichung für Sauerstoff gelöst wird, mit dem entwickelten Kinetikmodell ergibt sich ein Modell, welches die Simulation des Rußabbrands unter realen Bedingungen ermöglicht. Dieses berücksichtigt auch die Hemmung der Reaktion durch die lokale Abnahme der Sauerstoffkonzentration bei hohen Reaktionsraten. Durch eine theoretische Untersuchung wird zuvor gezeigt, dass der Einfluss von Gradienten der Sauerstoffkonzentration innerhalb der Rußschicht auf die Reaktionsrate vernachlässigt werden kann.

Das Abbrandmodell wird zur Validierung zunächst in einem Strömungsmodell des Versuchsreaktors bei solchen Randbedingungen angewandt, bei denen bei hoher Temperatur und langer Verweilzeit des Gases der Einfluss der Stofftransporthemmung messbar ist. Zur korrekten Wiedergabe der gemessenen Werte für die Abbrandrate und die Temperaturen im Versuchsreaktor ist die Berücksichtigung des Strahlungsaustausches zwischen der Filterprobe und der Reaktorwand notwendig.

Durch Vernachlässigung des Strahlungsaustausches in diesem Modell werden danach Bedingungen simuliert, bei denen die Reaktionsenthalpie weniger gut an die Umgebung abgeführt kann, was eher den Bedingungen im realen Filter ent-

spricht. Übersteigt die Abbrandrate nun eine kritische Schwelle, so nimmt die Energiefreisetzungsrates der Reaktion stärker zu als der konvektiv, durch Leitung und durch Wärmestrahlung abtransportierte Wärmestrom. Die Berechnung zeigt, dass die Reaktion durchgeht und die Temperatur in Bruchteilen einer Sekunde um mehrere hundert Kelvin zunimmt. Die Reaktion geht in einen neuen Gleichgewichtszustand über, in dem die Reaktionsrate durch die zugeführte Sauerstoffmenge limitiert wird. Zuvor zeigt sich jedoch ein Überschwingen in der Reaktionsrate und in der Temperatur, welches auf die Sauerstoffmenge zurückzuführen ist, welche sich zum Zeitpunkt des Durchgehens der Reaktion im Reaktorgehäuse befindet und die diffusiv zur Rußschicht transportiert wird.

An diesem Beispiel wird ein Abbrandmodell mit vereinfachter Berücksichtigung des Sauerstofftransports überprüft. Die Vernachlässigung der Sauerstoffdiffusion führt zu Abweichungen der Ergebnisse dieses Modells von jenen des höherwertigen Modells mit Lösung der Komponenten-Erhaltungsgleichung. Diesen Abweichungen stehen deutliche Einsparungen in der Rechenzeit gegenüber, da wegen der numerisch robusteren Formulierung der Quellterme des Modells keine Reduktion der Zeitschrittweite während des Durchgehens der Reaktion notwendig ist.

Das Rußabbrand-Modell wird schließlich auf das Strömungsmodell des Diesel-Partikelfilters zur Simulation der Regeneration übertragen. Es zeigt sich, dass der numerische Aufwand für den technischen Einsatz - etwa zur Bewertung von Konstruktionsalternativen - zu hoch ist. Darüber hinaus ist die Übereinstimmung von berechneten und während eines Motorprüfstandsversuchs gemessenen Temperaturen noch nicht zufriedenstellend. Als Ursache der Abweichungen wird das unterschiedliche kinetische Verhalten des Laborrußes im Vergleich zum realen Diesel-Ruß vermutet. Eine systematische Anpassung der Kinetikparameter an die Ergebnisse im Versuch ist aufgrund des zu hohen numerischen Aufwands nicht möglich.

Die Ergebnisse der Regenerationssimulation erlauben trotz der ungenauen Wiedergabe der lokalen Temperatur im Filter Aussagen qualitativer Gültigkeit über den Ablauf der Regeneration im Sintermetall-Partikelfilter. Temperaturunterschiede zu Beginn der Regeneration, welche aus der ungleichmäßigen Aufheizung der Filtertasche resultieren, bewirken lokal unterschiedliche Abbrandraten. Die Rußschicht brennt bevorzugt im radial innen gelegenen Bereich des Filters ab, während sie in der Nähe des Filtergehäuses deutlich langsamer abnimmt, so dass unvollständige Regeneration zu erwarten ist.

Abschließend ist fest zu halten, dass die Methode der numerischen Strömungsberechnung für den vorliegenden Taschenfilter mit seiner komplexen Geometrie zur Analyse der Strömung und der Beladung sinnvoll eingesetzt werden kann, dies für

die Regeneration jedoch nicht möglich ist. Die entwickelten Modelle zur Beladung und zum Abbrand der Rußschicht lassen sich auch auf andere Filtergeometrien übertragen, wobei überprüft werden muss, ob eine Anpassung der Parameter des Kinetikmodells für realen Diesel-Ruß notwendig ist.

Summary

Due to increasingly strict vehicle emission legislation, soot particulates must be separated from the exhaust gas of modern diesel cars by means of filtration. The engine back pressure increases as a soot layer grows on the surface of the particulate filter. As a consequence, the filter must be regenerated by increase of the exhaust gas temperature above the soot ignition temperature, which causes its oxidation. During the filter regeneration peak temperature events can occur that cause damage to the filter structure.

In this work a diesel particulate filter made from sintered metal is investigated. The filter medium is a compound of a stainless steel wire mesh on which a stainless steel granulate is sintered. From this compound wedge-shaped pockets are folded and welded gas-tight. 50 to 70 pockets are arranged around a sealing disc and welded to each other and a supporting ring around them, resulting in a cylindrical filter. The exhaust gas enters and leaves the filter in the direction of the cylinder axis. The sealing disc and the welds between the pockets are at its downstream end. Between the pockets gaps are formed which open at the upstream side of the filter and narrow along its axis. Inside each filter pocket a folded sheet of stainless steel called *spacer* maintains its form stability.

The complex flow pattern, the soot distribution, and the temperature changes during the thermal regeneration in the filter cannot be predicted by the models currently available in the literature, as these treat ceramic wall flow filters exclusively.

The foundation of this investigation is the numerical flow model of a single filter pocket using the commercial CFD software *Fluent*. After an adaption of the turbulence models to allow for a combination with porous zones, the flow field inside the filter can be calculated. The flow model is validated by pressure and PIV velocity measurements in a flow experiment of a single filter pocket in a plexiglass flow channel.

A disadvantage of the developed flow model is the size of the numerical grid of approximately 2 million cells. Besides the complexity of the pocket's geometry this is a result of the fine resolution of the boundary layer at the filter surface, which stems from the necessity of using a two-layer model for the turbulence

wall treatment. If standard or adapted wall functions were available for porous interfaces in the CFD software, a significant reduction of the numerical grid's size with smaller aspect ratios of the cells would be possible.

An extension of the flow model allows for the simulation of the soot layer build-up on the filter pocket's surface. Proportionality of the locally deposited soot mass to the filtration velocity is the main assumption, which is equivalent to assuming homogeneous distribution of the soot in the exhaust gas. It can be shown that due to the soot particle's small size this assumption holds valid.

Results of the filter loading simulation show that the soot is distributed non-uniformly on the filter surface at low specific soot load. The driving pressure gradient across the filter medium is small in parts of the filter pocket's upstream section, where the diameter of the flow channels formed by the spacer inside the pocket are small and flow losses are therefore significant. With increasing soot load the soot layer's pressure drop dominates and soot deposition non-uniformity ceases. In the fully loaded filter equal distribution of the soot is obtained.

In an experimental reactor with reduced geometrical complexity the soot reaction rate with its dependency on temperature and oxygen concentration is experimentally investigated. Isothermal temperature control of the experimental runs allows for the investigation of the reaction rate's dependency on the reaction progress or, in other words, the fraction of remaining soot mass. Initially the reaction rate increases up to a fraction of remaining soot mass of 75%, to subsequently decrease roughly proportionally to the soot mass. From the experimental results a kinetic model is deduced and the model parameters are determined.

Combination of the kinetic model with the CFD software, which is used to solve the oxygen conservation equation, results in the complete soot layer combustion model. Mass transfer limitation of the reaction due to local depletion of the oxygen concentration at high reaction rates is thus accounted for. An influence of oxygen concentration gradients within the soot layer on the reaction rate can be neglected, as is shown in a theoretical investigation.

The soot layer combustion model is applied to the geometry of the experimental reactor at high temperature and low space velocity. Under these conditions an influence of the mass transfer limitation on the reaction rate can be measured, which is correctly reproduced by the simulation. For the correct modeling of the conditions in the reactor the radiation heat transfer between the soot sample and the reactor wall must be estimated.

In a numerical experiment the cooling of the soot sample by means of radiation is disabled to create conditions where the reaction enthalpy of the soot oxidation is transferred to the surroundings less efficiently. This is closer to the situation inside

the particulate filter, as a filter pocket is mostly exposed to the neighboring surface of approximately same temperature. When the reaction rate exceeds a critical limit, the reaction enthalpy causes an acceleration of the reaction which releases more heat than can be transferred to the surroundings. Simulation results show, that temperature can rise during this runaway of the reaction by several hundred Kelvin in fractions of a second. The reaction enters into a new equilibrium where the reaction rate is limited by the oxygen supply. Before reaching this equilibrium, temperature and reaction rate overshoot this level due to oxygen present in the downstream volume of the reactor which is transported to the soot by means of diffusion.

This example is used to compare a simplified model of the reaction's mass transfer limitation to the more complex model including the oxygen conservation equation. Differences are observed that can be directly attributed to the neglect of diffusion. In return for this loss of accuracy, the computational time is significantly reduced because the simplified model's source terms are numerically more robust, and a reduction of the time step size during the reaction runaway is not necessary.

Finally the soot layer combustion model is transferred to the flow model of the particulate filter to simulate its regeneration. It turns out that the numerical expense of the full-scale model is too high for technical applications, e.g. assessment of design alternatives. Moreover, the agreement between the resulting temperatures inside the filter pocket with measurements during an engine test bench experiment is still unsatisfactory. A cause for this discrepancy is suspected to lie in the slightly different kinetic properties of the artificial soot used in the laboratory experiments compared to those of real life diesel soot. Systematic adaption of the model's kinetic parameters to the measured temperatures is no option, again due to the high numerical expense of the simulation.

In spite of the quantitative inaccuracy of the simulation results some conclusions can be drawn from them concerning the regeneration behavior of the sintered metal diesel particulate filter. Temperature differences at the beginning of the regeneration, that result from the non-uniform convective heat up, lead to local differences in the soot combustion rates. Near the filter's central duct soot reacts rapidly, while toward the outside the reaction proceeds significantly slower. Incomplete regeneration of the filter can thus be expected, but could be avoided by design changes targeting at flow uniformity improvement.

An overall conclusion of this work is, that the methods of computational fluid dynamics can be applied to the flow field analysis and the loading simulation of the investigated pocket filter, while for the regeneration this is not feasible. Transfer of the presented models to filters with a different geometry is possible. In that

Summary

case, an experimental verification of the kinetic model parameters for real diesel soot or an iterative adaption of the parameters to temperature measurements is advised.

1 Einführung und Zielsetzung der Arbeit

1.1 PKW-Abgase und Abgasnachbehandlung

Bei der motorischen Verbrennung von Kohlenwasserstoffen entstehen neben den primären Verbrennungsprodukten Wasser und Kohlendioxid gesundheitsschädliche Nebenprodukte. Ihr Auftreten ist die Folge von Verunreinigungen des Kraftstoffs sowie von unvollständiger Verbrennung aufgrund nicht idealer Gemischaufbereitung und inhomogenen Bedingungen im Zylinder. Der gasförmige Teil dieser Nebenprodukte umfasst Kohlenwasserstoffe, Kohlenmonoxid (CO), Stickstoffmonoxid und Stickstoffdioxid (NO_x) und Schwefeldioxid (SO_2). Der feste oder flüssige Bestandteil wird als *Partikel* bezeichnet. Durch zunehmend schärfere gesetzliche Vorgaben sind Fahrzeughersteller gezwungen, den innermotorischen Verbrennungsprozess weiter zu verbessern, um die Rohemissionen der Fahrzeuge zu vermindern. Weiterhin ist zu ihrer Erfüllung in steigendem Maße zusätzliche Nachbehandlung des Abgases notwendig.

1.1.1 Partikel

Für die europäische Gesetzgebung sind luftverunreinigende Partikel Abgasbestandteile, die bei einer Temperatur unterhalb von 52°C im Filter der Prüfeinrichtung aus dem verdünnten Abgas abgeschieden werden [123]. Ein kleinerer Teil dieser Partikel besteht aus Tröpfchen kondensierter Kohlenwasserstoffe oder Säuren, Metallabrieb und Rückständen der Kraftstoff- und Schmieröladditive. Der überwiegende Teil der Partikelmasse sind Rußpartikel aus Kohlenstoff mit Anteilen von Kohlenwasserstoffen, die bei der Verbrennung des Kraftstoffs entstehen [12, 69]. Rußbildung wird durch die inhomogene Gemischverteilung bei der dieselmotorischen Verbrennung und die dadurch auftretenden Zonen mit unterstöchiometrischer Sauerstoffkonzentration begünstigt.

Rußentstehung

Die Einspritzung des Diesel-Kraftstoffs erfolgt zum Ende der Kompressionsphase des Kolbenzyklus. Die Verbrennung setzt erst nach Verstreichen des Zünd-

verzugs ein, welcher den Zeitraum beschreibt, der für die Zerstäubung und Verdampfung des Kraftstoffs sowie für die Bildung von reaktionsbeschleunigenden Radikalen notwendig ist. In einer ersten Phase der Verbrennung wird das während des Zündverzuges entstandene Kraftstoff-Luft-Gemisch umgesetzt. Danach setzt die mischungskontrollierte Verbrennungsphase ein, in der das Fortschreiten der Verbrennung durch die turbulente Vermischung von Sauerstoff und Kraftstoff limitiert wird. Während dieser Phase entstehen Zonen mit sehr niedrigem Luftverhältnis, in denen Ruß bei Temperaturen zwischen 1300 °C und 2300 °C gebildet wird [117, 162].

Der Rußentstehungsprozess, in Abbildung 1.1 schematisch dargestellt, lässt sich in die Teilprozesse Pyrolyse, Nukleation, Oberflächenwachstum, Koagulation und Agglomeration unterteilen [138]. *Pyrolyse* beschreibt das thermische oder oxidative Zerfallen der langkettigen Kohlenwasserstoffe in kleinere, ungesättigtere Kohlenwasserstoffe (z. B. Acetylen C_2H_2) unter Abspaltung von Wasserstoff (Dehydrierung). Diese reagieren miteinander und bilden wiederum größere aliphatische und aromatische Kohlenwasserstoffe, welche durch weitere Addition kürzerer Moleküle, durch Ringbildungsreaktionen und Dehydrierung in hochmolekulare, kondensierte Nuklei übergehen [90, 138, 162]. Dieser Prozess wird als *Nukleation* bezeichnet.

Während des anschließenden *Oberflächenwachstums* werden weitere Acetylene und Polyacetylene aus der Gasphase an der Oberfläche der Nukleide angelagert, während weiterhin Dehydrierung stattfindet. Gleichzeitig kommt es zu Kollision und Zusammenschluss der wachsenden Rußteilchen. Da zu diesem Zeitpunkt die Massenzunahme durch Oberflächenwachstum deutlich überwiegt, bleibt die sphärische Form der Rußteilchen erhalten. Deshalb wird dieser Teilprozess *Koagulation* genannt [138].

Gegen Ende der Verbrennung nimmt die Gasphasenkonzentration von Acetylenen und Polyacetylenen stark ab, da bessere Durchmischung mit Sauerstoff und steigende Temperaturen ihre Reaktion zu inerten Spezies (CO_2 und H_2O) begünstigen. Hierdurch vermindert sich die Geschwindigkeit des Oberflächenwachstums der Rußteilchen. Als Konsequenz führt Kollision und Haftung der Partikel während der späten Phase der Verbrennung und nach Verlassen des Brennraums zu *Agglomeration*, also zur Ausbildung der charakteristischen, in Abbildung 1.2(a) gezeigten Teilchenkettchen.

Die Primärpartikel genannten sphärischen Partikel in den Rußketten weisen eine Substruktur auf, welche auf ihre Entstehung aus Oberflächenwachstum und Koagulation zurückzuführen ist: Mehrere Kernpartikel von 1,5-4 nm Durchmesser bilden, von ungeordneten Kristalliten und einer äußeren Schicht flächennormal

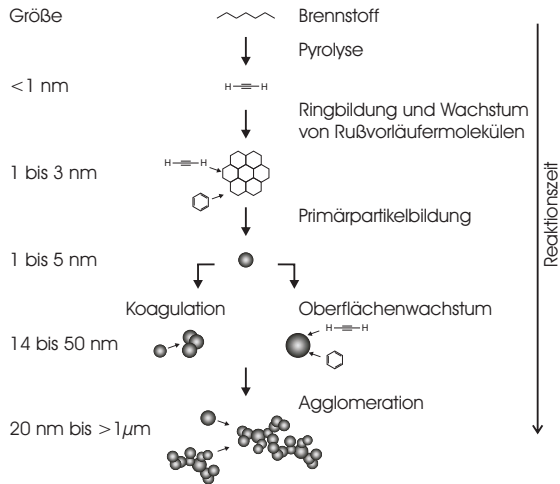
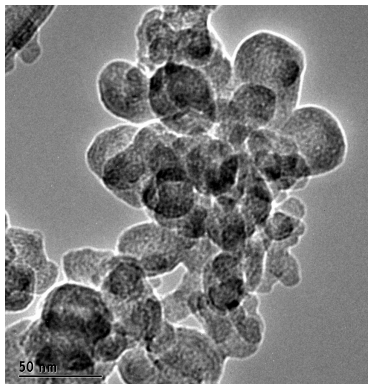
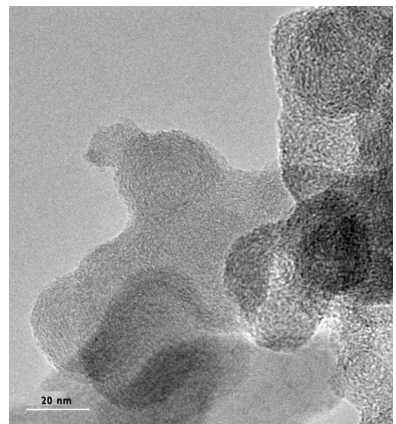


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung des Prozesses der Rußentstehung bei der Verbrennung nach [21]



(a) Agglomerat



(b) Nahaufnahme mehrerer Primärpartikel

Abbildung 1.2: TEM-Aufnahmen von Diesel-Ruß, mit freundlicher Genehmigung durch NMI Reutlingen, siehe auch [35]

ausgerichteter Kristallite umgeben, das annähernd sphärische Primärpartikel. Die äußere Schichtstruktur ist in Abbildung 1.2(b) zu erkennen. Angaben in der Literatur über die mittleren Primärpartikeldurchmesser schwanken zwischen 14 nm und 50 nm [98].

Gesundheitsschädliche Auswirkungen

Die gesundheitsschädliche Wirkung von eingeatmeten Partikeln wurde durch epidemiologische Untersuchungen nachgewiesen. Bis heute ist jedoch keine definitive Aussage möglich, welche Bestandteile der Partikel unter Wirkung welcher Mechanismen gesundheitsschädlich sind [52, 163]. Denkbare Schädigungsmechanismen von Partikeln, die in der Lunge in den Blutkreislauf übergehen, umfassen u. a. entzündliche Reaktionen im Lungengewebe oder in Blutgefäßen, direkte Wechselwirkung mit thrombotischen Folgen zwischen Blutbestandteilen und Partikeln sowie Dysfunktionen des autonomen Nervensystems ausgelöst durch Stimulation von Nerven in der Lunge [134]. Auf der Oberfläche der Diesel-Rußpartikel sind zudem polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (*PAK*) mit nachgewiesener Kanzerogenität und Mutagenität adsorbiert [130].

1.1.2 Abgasprüfung

Der für die Abgasgesetzgebung in Europa relevante Fahrzyklus für die Typzulassung neuer Fahrzeuge ist der *Modifizierte Neue Europäische Fahrzyklus*. Die in diesem Zyklus von der Prüfeinrichtung erfasste Partikelmasse darf den im Gesetz vorgeschriebenen Grenzwert nicht überschreiten. Für die seit dem 1. Januar 2005 gültige Abgasnorm *Euro 4* liegt dieser bei 25 mg/km [39, 126]. Ab 2009 gilt mit der Norm *Euro 5* ein Grenzwert von 5 mg/km [40], was aus heutiger Sicht nicht ausschließlich durch motorische Maßnahmen erreicht werden kann. Dadurch wird ein Diesel-Partikelfilter für alle Diesel-PKW notwendig.

1.2 Diesel-Partikelfilter

1.2.1 Belastungszyklen

Der Betriebszyklus des Diesel-Partikelfilters lässt sich in Beladungs- und Regenerationsphasen unterteilen. Während der Beladung wird der vom Motor emittierte Ruß im Filter abgeschieden, wodurch sich dessen Strömungswiderstand zunehmend vergrößert. Dieser zusätzliche Gegendruck führt zur Verschlechterung des Motorwirkungsgrads, bis hin zum vollständigen Stillstand und zur Schädigung des

Motors. Daher ist es notwendig, den im Filter eingelagerten Ruß durch Abbrand zu entfernen. Dieser Vorgang wird als Regeneration bezeichnet.

Beladung

Die zur Zeit eingesetzten Diesel-Partikelfilter funktionieren nach dem Prinzip der Oberflächenfiltration. Nur ein geringer Anteil des Rußes lagert sich zu Beginn der Beladung innerhalb des Filtermediums ein. Der maximale Abscheidegrad des Filters oberhalb von 98% stellt sich erst nach der Ausbildung einer Rußschicht auf der Oberfläche ein, an der im Folgenden die Abscheidung der Rußpartikel stattfindet.

In Abbildung 1.3 ist ein typischer Verlauf des Druckverlusts eines Filters über der flächenspezifischen Rußbeladung dargestellt. Zu Beginn der Beladung ist ein steiler Druckanstieg zu beobachten, welcher auf das Verstopfen von Poren durch die im Filtermedium abgeschiedenen Rußpartikel, das sogenannte *Filter Clogging*, zurückzuführen ist. Die Menge des so abgeschiedenen Rußes und seine Auswirkung auf den Strömungswiderstand des Filtermediums hängen stark von dessen mikroskopischer Beschaffenheit ab. Bei höherer Beladung nimmt der Filtergedrückt entsprechend der proportional zur eingelagerten Rußmenge wachsenden Rußschicht mit konstanter Steigung zu.

Für den sicheren Filterbetrieb ist die zuverlässige Bestimmung des Beladungszustands von besonderer Wichtigkeit. Wird die eingelagerte Rußmasse zu gering geschätzt und die Regeneration erst bei einer höheren Beladung eingeleitet, kann es zu filterschädigenden Temperaturspitzen oberhalb von 1000 °C kommen. Wird die Rußmenge überschätzt, werden die Regenerationsintervalle unnötig kurz, was sich negativ auf den mittleren Kraftstoffverbrauch und die Ölverdünnung des Fahrzeugs auswirkt.

Es besteht die Möglichkeit, aus dem über den Partikelfilter gemessenen Druckabfall mit Hilfe eines Modells auf die eingelagerte Rußmenge zu schließen. Solche Steuergerätemodelle sind aufgrund komplexer, nicht oder unzureichend berücksichtigter Effekte zwangsläufig ungenau. Von besonderer Schwierigkeit sind dabei der variable Strömungswiderstand des Rußes, ungleichmäßige Rußanlagerung, inhomogene Regenerationen, Veränderung der Filterkucheneigenschaften während Fahrzeugstandzeiten, Umlagerung des Rußes bei hohem Abgasmassenstrom sowie kontinuierlicher und betriebspunktabhängiger Abbrand durch NO₂.

Zusätzlich besteht die Möglichkeit, die vom Motor emittierte Rußmenge zu jedem Zeitpunkt aus stationären Rußemissions-Kennfeldern zu bestimmen und zu integrieren. Die Ungenauigkeit dieser Betrachtung ergibt sich aus Abweichungen

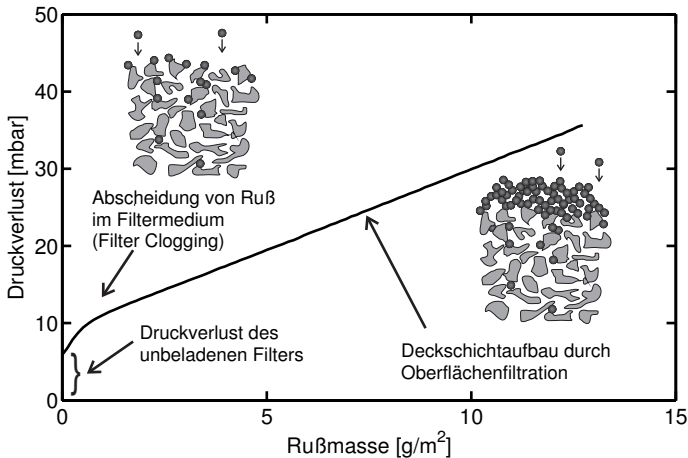


Abbildung 1.3: Gegendruckverhalten eines Diesel-Partikelfilters bei der Beladung mit Ruß und prinzipielle Darstellung der Rußabscheidung

im dynamischem Motorbetrieb sowie aus Abweichungen durch Herstellungstoleranzen, Verschleiß oder Defekte. Für eine korrekte Wiedergabe der Filterbeladung ist ebenfalls die Berücksichtigung der Rußmassenabnahme im Filter durch NO₂-Regeneration notwendig.

Regeneration

Beim Abbrand der Rußschicht im Filter werden drei Arten der Regeneration unterschieden: NO₂-Regeneration, thermische Regeneration und katalytische Regeneration.

Die NO₂-Regeneration bezeichnet den Abbrand des Rußes durch Oxidation mit NO₂ aus dem Abgas. Damit dieser Effekt eine signifikante Reduzierung der Rußmasse im Filter bewirken kann, muss die Temperatur im Filter über etwa 300 °C liegen und die NO₂-Konzentration im Abgas hoch sein. Letzteres setzt das Vorhandensein eines Oxidationskatalysators im Abgastrakt vor dem Filter voraus, damit das vorrangig vom Motor emittierte NO in NO₂ umgewandelt werden kann. Bei hohen Abgastemperaturen nimmt die NO₂-Konzentration entsprechend des thermodynamischen Gleichgewichts ab, wodurch sich die Wirksamkeit der NO₂-Regeneration auf ein Temperaturintervall zwischen 300 °C und 450 °C beschränkt.

Selbst in diesem Bereich eignet sie sich nicht zum vollständigen und schnellen Abbrand des eingelagerten Rußes.

Bei der thermischen Regeneration wird der Filter durch verschiedene Maßnahmen über die zur Oxidation des Rußes notwendige Temperatur von etwa 550 °C aufgeheizt. Um die Dauer der Regeneration zu verkürzen, werden in der Fahrzeugapplikation Zielwerte für die Regenerationstemperatur zwischen 600 °C und 650 °C verwendet. Diese hohen Abgastemperaturen werden nur bei Vollastbetriebspunkten erreicht. Um auch in anderen Betriebspunkten thermische Regeneration zu ermöglichen, wird durch motorische Maßnahmen die Abgastemperatur angehoben. Diese gezielte Veränderung der motorischen Verbrennung erfordert einen komplexen Eingriff in die Motorsteuerung, so dass eine automatische, vom Fahrer unbemerkte Regeneration des Filters erfolgen kann. Aus diesem Grund ist die Einführung des Diesel-Partikelfilters erst durch den Einsatz moderner Einspritzsysteme und Steuererätaefunktionen möglich geworden.

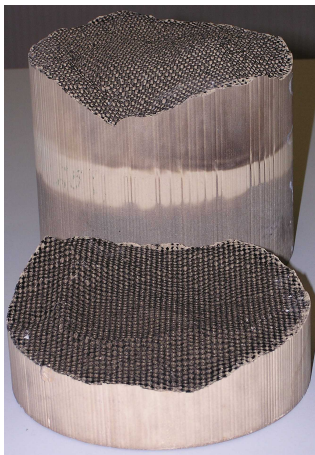
Durch die motorischen Maßnahmen - z. B. die Verschiebung des Einspritzbeginns, die Absenkung des Einspritz- oder des Ladedrucks oder die Verminderung des Abgasmassenstroms durch Drosselung der Ansaugluft - wird die Verschlechterung des thermodynamischen Wirkungsgrads der Verbrennung und damit eine Anhebung der Abgastemperatur erreicht. Der maßgebliche Temperaturhub wird jedoch durch Einspritzung zusätzlichen Kraftstoffs erreicht. Je nach Betriebspunkt und Regenerationsstrategie erfolgt diese Einspritzung kurz nach der Haupteinspritzung (*angelagerte Nacheinspritzung*) oder als späte Nacheinspritzung, wobei der Kraftstoff durch katalytische Verbrennung im Oxidationskatalysator vor dem Partikelfilter umgesetzt wird. Die Eingriffe müssen dabei momentan sowie Drehmoment- und geräuschneutral erfolgen.

Bei der katalytischen Regeneration wird der Ruß in Kontakt mit einer katalytisch aktiven Substanz gebracht, welche eine Erhöhung der Rußabbrandraten bewirkt. Dadurch lässt sich die Rußschicht schon bei Temperaturen um 450 °C in akzeptabler Zeit oxidieren. Der Cerium- oder Eisenkatalysator wird in Form eines Kraftstoffadditivs zugeführt [20, 168]. Den Vorteilen bei der Regeneration des Filters steht die zunehmende Erhöhung des Filtergegendrucks durch Additivveraschung gegenüber, so dass vorzeitig Ausbau und Reinigung des Filters erfolgen müssen.

Durch eine katalytische Beschichtung der Filteroberfläche ergeben sich Vorteile für die Regeneration, da Kohlenmonoxid- und Kohlenwasserstoffbestandteile des Abgases in direkter Nachbarschaft des aufzuheizenden Rußes exotherm oxidieren. Eine direkte Katalyse des Rußes kann nicht beobachtet werden, da hierzu der Kontakt zwischen Ruß und aktiven Zentren auf der Filteroberfläche zu schlecht

ist. Zusätzlicher Nutzen einer katalytischen Beschichtung ist der Umsatz des beim Rußabbrand entstehenden Kohlenmonoxids (*Sperrkat*-Funktion) und die Verbesserung der NO_2 -Regeneration. Grund hierfür ist die sogenannte Mehrfachnutzung des NO_2 , bei dem aus der Oxidation von Ruß mit NO_2 entstandenes NO an der katalytischen Beschichtung des Filters mit Sauerstoff zu sogenanntem *sekundären* NO_2 reagiert. Dieses *sekundäre* NO_2 diffundiert von der katalytischen Beschichtung zurück in die Rußschicht und kann dort wiederum Ruß oxidieren [115].

Während der Regeneration kann es im Filter zu starken Temperaturüberhöhungen kommen. Diese sind besonders ausgeprägt, wenn sich nach Beginn der Regeneration durch Änderung des Motorbetriebspunkts der Volumenstrom verringert und die Sauerstoffkonzentration im Abgas erhöht. Diese sogenannten *Worst-Case*-Regenerationen können insbesondere bei Filtern mit geringer volumetrischer Wärmekapazität und niedriger Wärmeleitfähigkeit zum Bauteilversagen durch Wärmespannungsrisse oder Schmelzen führen, wie in Abbildung 1.4(a) für einen Cordierit- und in Abbildung 1.4(b) für einen Sintermetall-DPF zu sehen ist. Bei katalytisch beschichteten Filtern wird zudem durch zu hohe Temperaturen die katalytische Beschichtung deaktiviert.



(a) Cordierit-Filter



(b) Sintermetall-Filter

Abbildung 1.4: Diesel-Partikelfilter, durch Worst-Case-Regeneration geschädigt

1.2.2 Technische Ausführung

Zum ersten Mal wurden Diesel-Partikelfilter für PKW in den 1980er Jahren in Kalifornien in *Mercedes-Benz*-Fahrzeugen angeboten [1]. Wegen der nicht ausgereifen Filtertechnik und der ungenügenden Funktionalität des Diesel-Einspritzsystems und der Motorsteuerung waren diese Versuche zum Scheitern verurteilt und die Fahrzeuge wurden bald nach der Serieneinführung zurückgerufen. Im Jahr 2000 rüstete *Peugeot* erstmals Fahrzeuge der Oberklasse mit einem Partikelfiltersystem aus. Charakteristisch für das *FAP* (französisch *filtre à particules*) genannte System ist der Siliziumkarbid-Wabenfilter und die Verwendung eines Kraftstoffadditivs zur Verringerung der Regenerationstemperatur [128].

Materialien

Das zur Zeit vorrangig für Diesel-Partikelfilter eingesetzte Material Siliziumkarbid (SiC) zeichnet sich durch hohe Wärmeleitfähigkeit und hohe Schmelztemperatur aus. Nachteilig für den Einsatz im Diesel-Partikelfilter ist der hohe Wärmeausdehnungskoeffizient und die daraus resultierende geringe Thermoschockbeständigkeit [101]. Die hohen Temperaturen, die im Fertigungsprozess notwendig sind, verursachen relativ hohe spezifische Herstellungskosten. Ein weiteres für Diesel-Partikelfilter eingesetztes Material ist *Cordierit*, ein Gemisch aus Magnesium-, Aluminium und Siliziumoxidkeramik. Die im Vergleich zum SiC etwas geringere Temperaturbeständigkeit macht Cordierit-Filter empfindlich für zu hohe Regenerationstemperaturen [13, 100, 101].

Die *Robert Bosch GmbH* entwickelte von 2002-2006 auf Basis von Patenten der *HJS GmbH* (siehe z. B. [70]) einen Diesel-Partikelfilter mit alternativer Geometrie zu den etablierten Wabenfiltern. Das bei diesem Konzept verarbeitete Material ist ein versinterter Verbund eines gestreckten Gitters aus Edelstahl und eines feinkörnigen Edelstahlgranulats. In Abbildung 1.5 ist links das Filtermedium abgebildet; die mittlere Abbildung zeigt das versinterterte Metallpulver in höherer Auflösung und das rechte Bild einen Seitenschnitt durch eine mit versintertertem Metallpulver gefüllte Masche des Streckmetallgitters. Besonderer Nachteil dieses Materials ist die hohe Dichte und die Abnahme der Festigkeit bei hoher Temperatur.

Geometrien

Keramische Diesel-Partikelfilter werden als Wabenfilter mit abwechselnd auf der Eintritts- und auf der Austrittsseite verschlossenen Kanälen ausgeführt. Das Abgas durchströmt die quadratischen Kanäle in axialer Richtung, wobei beim Über-

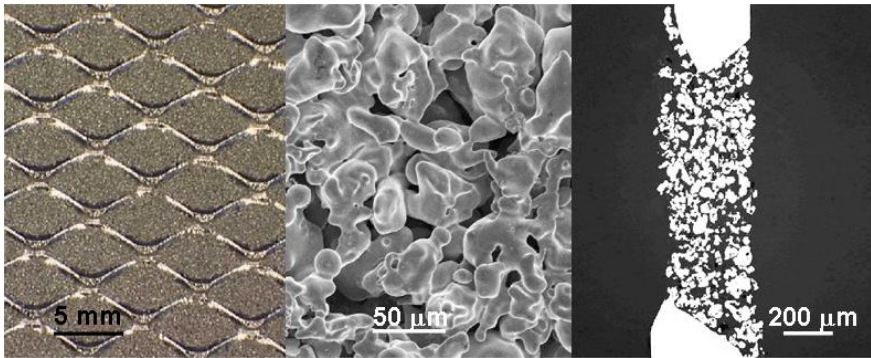


Abbildung 1.5: Filtermedium aus Sintermetall-Verbundmaterial. Links: Draufsicht auf die Oberfläche des Filtermediums bestehend aus Edelstahl-Streckgitter und versintertem Edelstahl-Granulat; in der Mitte: Vergrößerte Darstellung des Edelstahlgranulats; rechts: Schnitt durch eine mit Granulat gefüllte Wabe des Streckgitters

gang vom Einlass- in den Auslasskanal die Rußpartikel an der Oberfläche der Trennwand zwischen den Kanälen abgeschieden werden. Die Strömungsform in den Kanälen ist im überwiegenden Teil des Betriebsbereichs des Partikelfilters laminar.

Das konstruktive Grundelement des Sintermetall-DPF, dargestellt in Abbildung 1.6, ist eine keilförmige Filtertasche aus dem beschriebenen Edelstahl-Verbundmaterial, welche im Inneren durch einen wellenförmigen Abstandhalter (genannt *Spacer*) in Form gehalten wird. Durch unterschiedliche Anordnung der Taschen lassen sich prinzipiell Filter mit unterschiedlicher äußerer Form konstruieren. Die in Abbildung 1.6 gezeigte, gängige Variante ist der Filter mit zylindrischer Außenform, bei dem zwischen 50 und 70 Taschen um eine Dichtscheibe mit kreisförmigem Querschnitt positioniert werden. Die Befestigung erfolgt durch umlaufendes Verschweißen an den jeweils benachbarten Taschen, an der Dichtscheibe und am Gehäuseflansch. Im Zentrum des Filters verbleibt auf voller Länge bis zur Dichtscheibe ein offener, zylindrischer Kanal.

Die Anströmung des Sintermetall-DPF durch das mit Ruß beladene Abgas erfolgt in axialer Richtung. Das Abgas durchströmt die Spalte zwischen den keilförmigen Taschen, welche eine in der radialen Richtung konstante Höhe aufweisen und sich nach hinten verjüngen. Nachdem das Abgas das Filtermedium aus Streck-

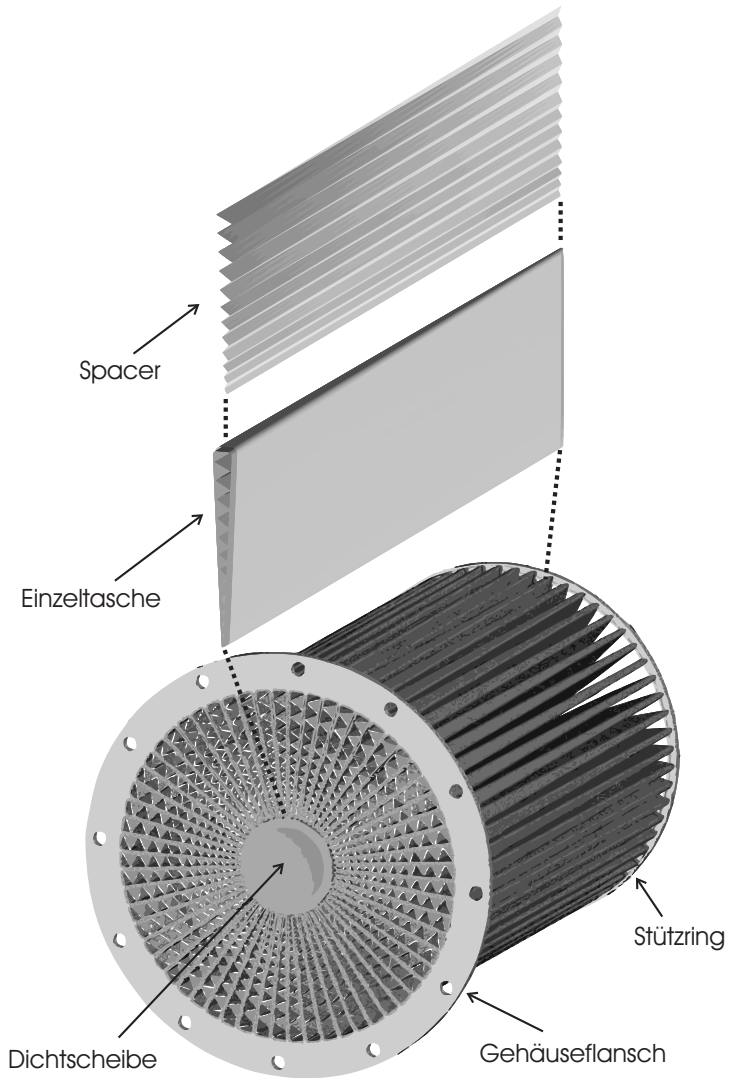


Abbildung 1.6: Ansicht des Sintermetallfilters, einer Filtertasche und eines Abstandshalters (Spacer) von der Abströmseite

gitter-Sintermetall-Verbundmaterial passiert hat, verläuft sie im Inneren einer jeweiligen Filtertasche in axialer Richtung in den vom Abstandshalter gebildeten Kanälen mit dreieckigem Querschnitt.

Vorteil der Taschenkonstruktion ist das große offene Volumen zwischen den Taschen des Filters. Während des Filterbetriebs kann sich hier eine Schicht aus Kraftstoffadditiv- und Motorölasche ansammeln, ohne dass der Weg der Abgasströmung versperrt wird. Hierdurch soll es ermöglicht werden, den Partikelfilter über die ganze Lebensdauer des Fahrzeugs ohne Wartung zu betreiben. Das Beladungs- und Regenerationsverhalten ist aufgrund seiner Neuartigkeit völlig unbekannt und steht daher im Fokus dieser Arbeit.

1.2.3 Modellierung von Diesel-Partikelfiltern in der Literatur

Für die Entwicklung von Diesel-Partikelfiltern und für ihre Applikation im Fahrzeug ist das Verständnis der komplexen physikalischen Vorgänge während Beladung und Regeneration notwendig. Neben experimentellen Untersuchungen am Motorprüfstand und im Fahrzeug können physikalisch-mathematische Modelle dabei unterstützen. Der erste umfassende Ansatz zur Modellierung von Wabenfiltern wurde von *Bissett und Shadman* [18, 19] veröffentlicht.

Hierbei wurden Vereinfachungen vorgenommen, welche aufgrund der einfachen Form der Strömung in Wabenfiltern gerechtfertigt sind. Die wichtigste Vereinfachung stellt dabei die Beschränkung des Modells auf ein repräsentatives Kanalpaar dar, wobei nur über den jeweiligen Kanalquerschnitt gemittelte Werte betrachtet werden. Die zusätzliche Vernachlässigung der Diffusion und der Wärmeleitung in axialer Richtung erlaubt die Annäherung der Transportgleichungen durch ein System eindimensionaler, gewöhnlicher Differentialgleichungen. Folgende Untersuchungen bauten meist auf diesem Ansatz auf und haben das Verständnis der Vorgänge während der Beladung und der Regeneration erweitert. Inzwischen sind kommerzielle Werkzeuge zur Berechnung von Druckverlust und Temperatur in Wabenfiltern verfügbar [160].

Druckverlustberechnung und Modellierung der Filtration

Wegen seiner Bedeutung für die fahrzeugtechnische Applikation bildet die Modellierung des vom Partikelfilter verursachten Druckverlusts einen Schwerpunkt der in der Literatur veröffentlichten Untersuchungen. Eine auf den Modellen von *Bissett* basierende Arbeit von *Konstandopoulos und Johnson* [76] beschäftigt sich mit den Abhängigkeiten des Druckverlusts von Wabenfiltern von geometrischen Parametern wie Zelligkeit, Wandstärke und Länge.

Das Druckverlustmodell aus [76] wurde in [75, 82, 84] um die Filtration sowie um die Rückwirkung der Beladung auf den Druckverlust erweitert. Dabei wurde die Verengung des Eintrittskanals durch den Aufbau der Rußdeckschicht berücksichtigt. Es wurden einfache Ansätze für die Modellierung der Veraschung des Kanals gezeigt, die später in [81] erweitert wurden. Die Übertragbarkeit des Modells auf Wabenfilter mit nicht-quadratischen Kanalquerschnitten wurde in [86] gezeigt. Untersuchungen zum betriebspunktabhängigen Strömungswiderstand des Rußes wurden in [85] vorgenommen.

Das Filtrationsverhalten von Diesel-Partikelfiltern unter Berücksichtigung verschiedener Filtrationsmechanismen ist Gegenstand der Dissertation von *Opris* [109]. Der Deckschichtaufbau in einem Einzelkanal eines Wabenfilters wurde in [32, 33] durch numerische Berechnung der Bahnen von repräsentativen Rußpartikeln in zwei Raumdimensionen untersucht.

Modellierung der Regeneration

In dem bereits erwähnten Modell von *Bissett und Shadman* [19] wurde die Entwicklung der mittleren Filtertemperatur mit der Zeit berechnet (*Rührkesselmodell*). Das Modell wurde von *Bissett* [18] zu einem eindimensionalen Modell eines repräsentativen Einzelkanals erweitert. Die Rückwirkung der lokalen Abnahme der Sauerstoffkonzentration auf die Reaktionsrate wurde berücksichtigt, allerdings unter Vernachlässigung der Diffusion als Stofftransportmechanismus.

Koltsakis und Stamatelos übernahmen die Regenerationsmodelle von *Bissett und Shadman* und führten in [71] eine erste experimentelle Überprüfung mit Messergebnissen von *Tan et al.* [147] durch. Die Abweichung zwischen Simulationsergebnissen und experimentellen Daten wurden durch Ungenauigkeiten in den Modellkonstanten der Reaktionskinetik erklärt. Die Modelle wurden in [72, 73] um die katalytische Oxidation des Rußes erweitert. Bei zusätzlicher Diskretisierung der Energiegleichung zur Auflösung von Temperaturgradienten in der Rußschicht ergaben sich geringfügig höhere Reaktionsraten bei niedrigen Strömungsgeschwindigkeiten und hohen Rußschichtdicken [48]. In [49] wurde erstmalig die Diffusion als Transportmechanismus für Sauerstoff berücksichtigt. Es ergaben sich signifikante Unterschiede zum bisherigen Modellierungsansatz für unkontrollierte Regenerationen mit hohen lokalen Spitzen in der Temperatur und der Reaktionsrate.

Desweiteren wurde durch Kopplung eines eindimensionalen Regenerationsmodells mit einem kommerziellen Strukturmechanikprogramm ein Werkzeug zur Vorhersage dreidimensionaler Temperaturgradienten in einem Partikelfilter mit dem SiC-typischen *Brick*-Aufbau geschaffen [118, 119]. Dazu mussten weit reichende

Vereinfachungen bezüglich des Strömungsfelds vorgenommen werden. In einer experimentellen Überprüfung konnte nur begrenzte Übereinstimmung mit den Messergebnissen erzielt werden [145].

Die Modellierung der Regeneration des Partikelfilters wurde von *Konstandopoulos et al.* in [77, 78] aufgegriffen. Es fand ebenfalls ein Abgleich eines Regenerationsmodells mit Messergebnissen von *Tan et al.* [147] und *Park et al.* [110] statt. Die Kinetikparameter des Modells, welches im Wesentlichen dem um zusätzliche Terme für katalytische Reaktionen erweiterten, eindimensionalen *Bissett*-Modell [18] entspricht, wurden nicht veröffentlicht. In [82] wurden Ansätze für die Modellierung des Rußabbrandes mit NO_2 präsentiert, die von *Zhang et al.* in [169] vertieft wurden.

Die Erweiterung des Modells von einem diskreten, repräsentativen Kanal auf den Gesamtfilter war Inhalt einer Arbeit von *Konstandopoulos et al.* [80]. Hier wurde die genaue Kanalgeometrie nicht aufgelöst, sondern Fluid im Einströmkanal, Fluid im Ausströmkanal, Filterwand und Ruß wurden als räumlich koexistierende Phasen betrachtet. Für das Modell wurden axialsymmetrische Strömungsverhältnisse angenommen, wobei ein möglicher Übertrag auf ein dreidimensionales Modell aufgezeigt wurde. Einen alternativen Ansatz hierzu stellt die Studie von *Miyairi et al.* [103] dar, bei der die Übertragung vom Einzelkanal auf den Gesamtfilter über die gekoppelte Lösung der Modellgleichungen für eine Anzahl von repräsentativen Einzelkanälen erfolgte.

In [79] wurde der Abbrand der Rußschicht detaillierter betrachtet und die Abnahme der Sauerstoffkonzentration unter Berücksichtigung der sich bewegenden Rußschichtoberfläche in die Formulierung der Abbrandrate aufgenommen. Dabei wurde wiederum die Diffusion des Sauerstoffs vernachlässigt. Die numerische Simulation der Strömung in einem regenerierenden Einzelkanalpaar in einem Wabenfilter mit Berücksichtigung der Zunahme der Rußschichtpermeabilität wurde in [159] gezeigt.

Übertragbarkeit auf den Sintermetallfilter

Die in der Literatur veröffentlichten Ansätze zur Modellierung von Diesel-Partikelfiltern beschäftigen sich ausschließlich mit Waben-DPF. Die darin vorliegende, relativ einfache Strömungsform rechtfertigt Modellvereinfachungen, die für die hier betrachtete Taschengometrie nicht gültig sind.

Das Strömungsfeld im Sintermetallfilter ist zunächst unbekannt. Im Gegensatz zu Wabenfiltern ist aber in dieser Geometrie neben dem Transport in axialer Richtung auch eine signifikante Strömung in radialer Richtung zu erwarten. Wegen

der im Vergleich zu den Kanälen der Wabenfilter relativ großen Abmessung des Spalts zwischen benachbarten Taschen ist auch die Turbulenz der Strömung als Einflussfaktor nicht a priori auszuschließen.

Die kinetischen Parameter wurden in den veröffentlichten Modellen nur teilweise offen gelegt und sind zum Teil widersprüchlich. Überwiegend wurden die Parameter durch Vergleich mit gemessenen Temperaturverläufen während der Regeneration angepasst. Eine solche iterative Anpassung der Kinetikparameter ist nur dann möglich, wenn die Lösung der Modellgleichungen geringen numerischen Aufwand verursacht.

1.3 Zielsetzung der Arbeit

Zielsetzung der Arbeit ist die Untersuchung des Strömungs-, Beladungs- und Regenerationsverhaltens des Sintermetall-Diesel-Partikelfilters.

Im Unterschied zum keramischen Wabenfilter ist das Strömungsfeld im Sintermetallfilter in Taschenform unbekannt. Daher wird in Kapitel 2 mit Hilfe von Strömungsexperimenten ein Strömungsmodell entwickelt und experimentell überprüft. Der Aufbau der Rußschicht auf der Filteroberfläche ist Gegenstand von Kapitel 3. Hierbei steht die Frage im Mittelpunkt, ob beim voll beladenen Filter eine signifikante Ungleichverteilung des Rußes zu erwarten ist.

Aufgrund der Bedeutung der Filterregeneration in der fahrzeugtechnischen Gesamtanwendung ist diesem Thema in den Kapiteln 4 und 5 ein größerer Teil dieser Arbeit gewidmet. Die iterative Anpassung von Kinetikparametern ist in einem Regenerationsmodell, welches auf der Berechnung des dreidimensionalen, instationären Strömungsfelds basiert, wegen des numerischen Aufwands nicht möglich. Daher wird in Kapitel 4 zunächst durch reaktionstechnische Experimente in einem Versuchsreaktor mit reduzierter geometrischer Komplexität ein Modell der Ruß-Abbrandkinetik entwickelt. Der Stofftransporthemmung der Reaktion bei hohen Reaktionsraten wird dabei besondere Aufmerksamkeit gewidmet.

Die Übertragung des Kinetikmodells auf das Strömungsmodell aus Kapitel 2 in Kapitel 5 erlaubt die Berechnung instationärer Temperaturfelder während der Regeneration. Da die Kopplung komplexer Reaktions- und Strömungsvorgänge einen hohen numerischen Aufwand bedeutet, sollen in dieser Arbeit neben den Möglichkeiten auch die Grenzen des technisch Machbaren aufgezeigt werden.

2 Strömungsanalyse des Sintermetallfilters

Im Gegensatz zu keramischen Wabenfiltern ist das Strömungsfeld im Sintermetallfilter unbekannt. Für die nachfolgenden Untersuchungen zur Beladung und Regeneration des Filters bildet ein Strömungsmodell die Grundlage. Ein solches Modell wurde mit Hilfe der Strömungssimulationssoftware *Fluent* erstellt. Durch Abgleich mit experimentellen Ergebnissen an einer Ersatzgeometrie wurde das Strömungsmodell validiert.

2.1 Modellierung

Um das Strömungsfeld im Inneren des Sintermetallfilters zu bestimmen, wurde die Strömungssimulationssoftware *Fluent* in der Version 6.2.16 [41] zur Lösung der *Navier-Stokes*-Gleichungen eingesetzt. Auf die hinlänglich bekannten Gleichungen wird hier nur im Zusammenhang der Behandlung des porösen Filtermediums eingegangen. Die schließlich verwendeten Modellgleichungen in der freien Strömung und innerhalb des Filtermediums sind am Ende des Abschnitts in Tabelle 2.1 aufgeführt.

2.1.1 Rechengebiet

Grundlage des Strömungsmodells ist die Geometrie einer Einzeltasche des in Abschnitt 1.2.2 beschriebenen Sintermetall-DPF in einer Ausführung mit 60 Taschen. Für diese Untersuchung wurde davon ausgegangen, dass die Anströmung im Abgasrohr axialsymmetrisch und drallfrei ist. Unter diesen Annahmen sind Filtergeometrie und zu erwartende Strömungsform periodisch und das Rechengebiet kann auf eine einzelne Tasche beschränkt werden.

In Abbildung 2.1 ist das Rechengebiet in Seitenansicht dargestellt. Die Anströmung des Filtergehäuses erfolgt in der Darstellung von links. Stromauf des Filters erweitert sich das Abgasrohr in einem Konus auf den größeren Durchmesser mit einem Winkel von 33° zwischen Gehäusewand und Rotationsachse. Die Abströmung des Filters ist in einem identischen Konus ausgeführt. Der Auslass des Rechengebiets liegt 4 Rohrdurchmesser stromab des Konusendes.

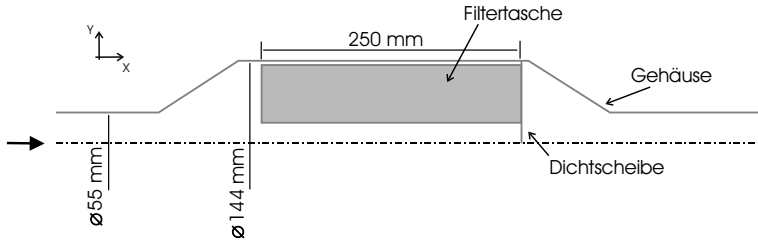


Abbildung 2.1: Seitenansicht des Rechengebiets

2.1.2 Randbedingungen

Am Eintritt des Rechengebiets wurde der Massenstrom des Abgases vorgegeben. Das Fluid wurde als inkompressibles, ideales Gas behandelt, dessen Stoffwerte entsprechend der Massenanteile aus den Stoffwerten der Komponenten N_2 , O_2 , CO_2 und H_2O temperaturabhängig vorgegeben wurden [154]. Desweiteren wurde die Strömung am Eintritt als pulsationsfrei angenommen. Als Randbedingung für die beiden Gleichungen des Turbulenzmodells erfolgte die Angabe des turbulenten Längenmaßes ($\ell = 0,07 d$ [41]) und der turbulenten Intensität im Bereich 5-10%. Austrittsseitig wurde verschwindender statischer Relativdruck gegenüber dem Referenzdruck von 1013 mbar als Randbedingung gesetzt.

An den seitlichen Flächen des Rechengebiets wurden periodische Randbedingungen vorgegeben. Die Kopplung der Flächen erfolgte in der Weise, dass Flüsse, welche über eine der Flächen aus dem Rechengebiet austreten, an der entsprechenden Koordinate der anderen Fläche wieder eintreten. So wurde eine Asymmetrie des berechneten Strömungsfelds ermöglicht, wie sie sich auch bei drallfreier Anströmung, z. B. bedingt durch die Asymmetrie des Spacers, ergeben kann.

2.1.3 Impulsbilanz im Filtermedium

Innerhalb des Filtermediums wirkt auf das strömende Gas der Widerstand der porösen Matrix. Diese Wechselwirkung umfasst zum einen die an den Porenwänden verrichtete Reibungsarbeit, zum anderen Verluste in der Einschnürung der Strömung in engen Porenquerschnitten. Die Wirkung auf die Strömung wird durch einen Quellterm \mathbf{S} in der Impulserhaltungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{S} \quad (2.1)$$

modelliert. Bei niedriger Strömungsgeschwindigkeit ist der Strömungszustand im Inneren des Filtermediums schleichend. Der Druckverlust wird durch die Reibung dominiert und steht in linearem Zusammenhang mit der Strömungsgeschwindigkeit. Bei isotroper Permeabilität gilt das *Darcy*-Gesetz [67]:

$$\mathbf{S} = -\frac{\mu}{K}\mathbf{v}. \quad (2.2)$$

Die Permeabilität K stellt eine Stoffgröße des Filtermediums dar, die üblicherweise auf die freie Anströmgeschwindigkeit bezogen wird, d. h. die durch die Versperrwirkung der porösen Matrix verursachte Beschleunigung wird nicht berücksichtigt.

Bei höherer Strömungsgeschwindigkeit nehmen Verluste in der Einschnürung der Strömung in engen Porenquerschnitten zu. Dem wird üblicherweise durch Modifizierung des *Darcy*-Gesetzes durch Hinzufügen eines in der Geschwindigkeit quadratischen Terms - der sogenannten *Forchheimer*-Erweiterung - Rechnung getragen, was mathematisch der häufig verwendeten *Ergun*-Gleichung entspricht [67]. In [161] definiert *Ward* eine charakteristische *Reynolds*-Zahl

$$\text{Re}_{K^{1/2}} = \frac{|\mathbf{v}|\sqrt{K}}{\nu} \quad (2.3)$$

und gibt an, dass unterhalb eines kritischen Werts $\text{Re}_{K^{1/2},\text{kritisch}} = 0,018$ der bei Vernachlässigung des quadratischen Terms zu erwartende Fehler unterhalb von 1% ist. Die Permeabilität unterschiedlicher Ausführungen des Sintermetall-Filtermediums wurde durch Messungen zu $0,5 \mu\text{m}^2$ bis $3 \mu\text{m}^2$ bestimmt. Im Betriebsbereich des Diesel-Partikelfilters ist daher $\text{Re}_{K^{1/2}} = \mathcal{O}(10^{-3}) \dots \mathcal{O}(10^{-2})$. Die *Forchheimer*-Erweiterung ist danach bei der Berechnung des Strömungswiderstands nicht notwendig. Eine Überprüfung dieser Annahme findet im experimentellen Teil in Abschnitt 2.2 statt.

2.1.4 Beeinflussung der Turbulenz durch das Filtermedium

Die Strömung im Abgasrohr stromauf des Diesel-Partikelfilters ist in einem großen Teil des Betriebsbereichs turbulent, was sich in einer mit dem Durchmesser des Abgasrohres gebildeten *Reynolds*-Zahl Re_d zwischen 3.000 und 100.000 ausdrückt. Im Spalt zwischen den Filtertaschen und in den Poren des Filtermediums werden turbulente Schwankungen unterdrückt und klingen ab.

In der Strömungssimulationssoftware stehen Turbulenzmodelle zur Berechnung des lokalen Turbulenzgrades und der Rückwirkung der Turbulenz auf die mittlere Strömungsgeschwindigkeit zur Verfügung. Im Rahmen dieser Arbeit wurde untersucht, ob die Wirkung der porösen Matrix auf die Turbulenz durch die Zwei-

Gleichungs-Modelle berücksichtigt werden kann. Das *Reynolds*-Spannungs-Modell der Turbulenz wurde wegen des erwarteten hohen numerischen Aufwands nicht in Betracht gezogen.

Die freien Querschnitte innerhalb des Filtermediums haben charakteristische Abmessungen von $\mathcal{O}(10) \mu\text{m}$. Größere turbulente Wirbelelemente verlieren durch Reibung an der porösen Matrix Energie. Mit dem Auftreten kleinerer Wirbelelemente ist nicht zu rechnen, da die *Kolmogorow*'sche Mikroskala $l_K \approx d/\text{Re}_d^{3/4}$ selbst für die maximale *Reynolds*-Zahl von 100.000 größer als $\mathcal{O}(10) \mu\text{m}$ ist. Daher ist eine Anforderung an das Turbulenzmodell, dass die Turbulenz innerhalb der Porosität gedämpft wird.

Eine weitere Anforderung ist die korrekte Wiedergabe der Grenzschicht an der porösen Oberfläche. Wegen seiner niedrigen Permeabilität wird das Filtermedium überwiegend normal zur Oberfläche durchströmt. Bezüglich der übrigen Geschwindigkeitskomponenten bildet sich eine Grenzschicht aus - ähnlich wie an einer undurchlässigen Wand. Die damit einher gehenden Geschwindigkeitsgradienten führen nicht zu einer Anfachung der Turbulenz, da turbulenten Wirbeln durch Reibung an der porösen Wand Energie entzogen wird und diese an der Ausdehnung gehindert werden.

Eine nähere Untersuchung der in der Strömungssimulationssoftware implementierten Zwei-Gleichungs-Modelle zeigte, dass die notwendige Wandbehandlung der turbulenten Größen an der porösen Oberfläche, also der Grenzfläche zwischen Filtermedium und Fluid, fehlt. Die hohen Geschwindigkeitsgradienten in der Grenzschicht führen dort zu hoher Turbulenzproduktion, da die dämpfende Wirkung der porösen Matrix nicht berücksichtigt wird. Eine Modellierung dieser Wirkung findet nur in der Nähe von undurchlässigen Wänden statt. Daher wurden die Turbulenzmodelle, das k - ε -Modell und das k - ω -Modell, modifiziert.

k - ε -Modell

Beim Zwei-Schichten-Modell für die Wandbehandlung der Gleichungen des k - ε -Turbulenzmodells wird für jede Zelle des Rechengebiets überprüft, ob sie sich in einer wandnahen Grenzschicht befindet. Entscheidendes Kriterium ist eine sogenannte *turbulente Reynolds-Zahl* [25]

$$\text{Re}_y = \frac{\rho y \sqrt{k}}{\mu} \quad (2.4)$$

mit dem Abstand zur Wand y und einem kritischen Wert $\text{Re}_{y,\text{kritisch}} = 200$. Für $\text{Re}_y < \text{Re}_{y,\text{kritisch}}$ kommt in der Zelle eine *Low-Reynolds*-Formulierung des k - ε -Modells zur Anwendung, d. h. eine alternative Formulierung der turbulenten Vis-

kosität μ_t sowie die Bestimmung der turbulenten Dissipation ε aus einer algebraischen Gleichung anstatt aus der Erhaltungsgleichung [25, 41] (siehe Tabelle 2.1).

Die Berücksichtigung der porösen Oberfläche in diesem Modell war möglich durch Überschreiben der Variable y für den Abstand der Zelle zur nächsten Wand mittels einer benutzerdefinierten Funktion (englisch *user-defined function UDF*) mit einem neuen Wert

$$y_{\text{neu}} = \min(y, |\mathbf{r}_{\text{Porosität, min}}|) , \quad (2.5)$$

wobei $\mathbf{r}_{\text{Porosität, min}}$ dem Vektor vom Mittelpunkt der Zelle zum nächsten Mittelpunkt einer äußeren Zelloberfläche der porösen Zone entspricht, wie in Abbildung 2.2 dargestellt.

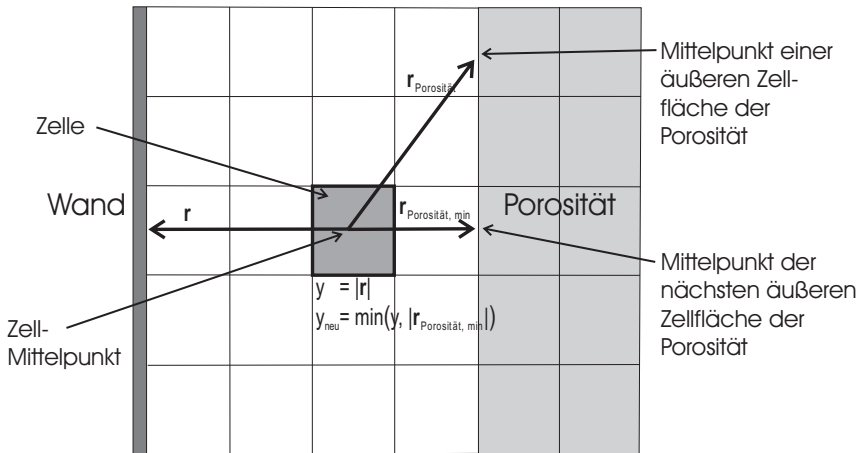


Abbildung 2.2: Bestimmung des Abstands y zur nächsten Wand unter Berücksichtigung der porösen Oberfläche

Bezüglich der Auflösung des numerischen Gitters ist beim Zwei-Schichten-Modell sicherzustellen, dass an der Oberfläche der Porosität mehrere Zellen in der durch das Re_y -Kriterium definierten Grenzschicht liegen. Eine Berücksichtigung der porösen Wand in Modellen für gröbere Gitter, welche auf dem Standard-Wandgesetz beruhen, war nicht möglich.

Bei der Verwendung des so modifizierten k - ε -Modells war die turbulente kinetische Energie innerhalb des 0,3 mm dicken Filtermediums vernachlässigbar

klein. Bei der Durchströmung von porösen Zonen mit größeren Abmessungen ist eine Zunahme der turbulenten kinetischen Energie innerhalb der Porosität denkbar, welche in der Realität durch die poröse Matrix gedämpft würde. Eine solche Dämpfung kann durch Vorgabe einer hinreichend großen turbulenten Dissipation ε als Konstante $\varepsilon_{\text{Porosität}}$ erreicht werden.

k - ω -Modell

Die Gleichungen des k - ω -Modells werden im gesamten Strömungsgebiet einschließlich der viskosen Unterschicht unverändert gelöst. An Wänden wird als Randbedingung verschwindende turbulente kinetische Energie vorgegeben. Diese Randbedingung ergibt sich an der porösen Oberfläche, wenn in der Porosität die turbulente kinetische Energie gedämpft wird. Dies wurde durch die Einführung eines zusätzlichen Quellterms $c\omega$ in der Erhaltungsgleichung für ω erreicht (siehe Tabelle 2.1). Der Wert des Parameters c muss mindestens so groß sein, dass die Dämpfung gegenüber der Anfachung überwiegt und k verschwindet [99]. Ein Wert von $c = \mathcal{O}(10^5)$ erwies sich dafür als geeignet. Die Gitterauflösung muss so gewählt werden, dass mehrere Zellen in der viskosen Unterschicht liegen.

Die Plausibilität der erläuterten Modifikationen wurde im Vergleich mit einem Experiment aus der Literatur überprüft. Dabei zeigte sich für eine turbulente Plattengrenzschicht über einer durchlässigen Wand eine gute Übereinstimmung, wie in Anhang A dargestellt. Für die im folgenden Abschnitt dargestellten Berechnungen wurde das k - ε -Modell wegen der etwas geringeren Anforderung an die Auflösung des numerischen Gitters verwendet.

2.1.5 Rechengitter

Die Erstellung des numerischen Gitters erfolgte mit dem Programm ANSYS ICEM CFD [7] auf der Basis von CAD-Daten. Die Geometrie zeichnet sich im Taschenzwischenraum durch Spalte mit niedriger Höhe aus. Da an den Oberflächen des Filtermediums eine hohe Auflösung zur korrekten Wiedergabe der Grenzschichten erreicht werden sollte, wurden hexaederförmige Zellen verwendet, da diese im Vergleich zu Tetraedern auch bei ungünstigem Seitenlängenverhältnis unverzerrt bleiben. In Abbildung 2.3 ist das Rechengitter des Fluids um die Filtertasche dargestellt.

Auch das Innere der Tasche wurde durch ein Hexaedergitter abgebildet, welches in Abbildung 2.4 dargestellt ist. Die Gittertopologie im Tascheninneren weicht wegen der komplexen Struktur des Abstandshalters von jener des übrigen Strö-

freie Strömung	Filtermedium
Kontinuitätsgleichung: $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$	
Impulserhaltungsgleichung: $\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \frac{\mu}{K} \mathbf{v}$
k-ε-Turbulenzmodell: Gleichung der turbulenten kinetischen Energie: $\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \nabla \cdot (\rho k \mathbf{v}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + G_k - \rho \varepsilon$	$\varepsilon = \text{konstant} = \varepsilon_{\text{Porosität}}$
Gleichung der turbulenten Dissipationsrate: außerhalb der Grenzschicht ($\text{Re}_y = \frac{\rho y \sqrt{k}}{\mu} > 200$): $\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \nabla \cdot (\rho \varepsilon \mathbf{v}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{1\varepsilon} G_k - C_{2\varepsilon} \rho \varepsilon)$	$\varepsilon = \frac{k^{3/2}}{\ell_\varepsilon}$
in der Grenzschicht ($\text{Re}_y = \frac{\rho y \sqrt{k}}{\mu} \leq 200$): $\varepsilon = \frac{k^{3/2}}{\ell_\varepsilon}$	
k-ω-Turbulenzmodell: Gleichung der turbulenten kinetischen Energie: $\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \nabla \cdot (\rho k \mathbf{v}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + G_k - Y_k$	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \omega) + \nabla \cdot (\rho \omega \mathbf{v}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega \right] + \omega \left(\frac{\alpha G_k}{k} + c \right) - Y_\omega$
Gleichung der turbulenten Wirbelfrequenz: $\frac{\partial}{\partial t} (\rho \omega) + \nabla \cdot (\rho \omega \mathbf{v}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega \right] + \omega \left(\frac{\alpha G_k}{k} \right) - Y_\omega$	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \omega) + \nabla \cdot (\rho \omega \mathbf{v}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega \right] + \omega \left(\frac{\alpha G_k}{k} + c \right) - Y_\omega$

Tabelle 2.1: Übersicht der Gleichungen des Strömungsmodells

mungsgebiets stark ab, so dass zwei über numerische Interfaces verknüpfte Gitter erzeugt wurden.

In den Grenzschichten an der Filteroberfläche wurde das Rechengitter hoch aufgelöst. Die dem Filtermedium nächsten Zellen wiesen maximal eine flächennormale Abmessung von 0,1 mm auf. Die Gesamtzahl der Zellen im Rechengitter betrug etwa 2 Mio., wobei 560.000 Zellen auf das Innere der Filtertasche entfielen.

2.2 Experimentelle Untersuchungen

Die Gültigkeit des Strömungsmodells soll durch einen Vergleich mit experimentellen Ergebnissen verifiziert werden. Der reale Diesel-Partikelfilter ist bezüglich der Strömungsgrößen, abgesehen vom insgesamt anliegenden Differenzdruck, messtechnisch schlecht zugänglich. Daher wurde ein Experiment durchgeführt, in dem die gleichen physikalischen Phänomene die Strömung dominieren, aber eine bessere Zugänglichkeit gegeben ist.

2.2.1 Experimenteller Aufbau und Durchführung der Experimente

Die Charakteristiken der Strömung, die durch das Experiment wiedergegeben werden sollten, waren die turbulente Anströmung, die Querschnittserweiterung, der konvergente Spalt zwischen den Filtertaschen sowie der freie Querschnitt im Zentrum des Filters.

Eine Skizze des mit diesen Vorgaben konstruierten Strömungskanals ist in Abbildung 2.5 dargestellt, ein Foto des Aufbaus in Abbildung 2.6. Der Strömungskanal besteht aus ebenen Plexiglaswänden. Der Spalt zwischen Filteroberfläche und Plexiglaswand entspricht dadurch in seiner Geometrie nicht exakt dem Spalt zur benachbarten Filtertasche im realen Filter. Seine Breite wurde zudem etwas größer gewählt, um Wechselwirkungen des Laserlichtschnitts des PIV-Messsystems mit dem Filtermedium zu verringern. Der abströmseitige Kanal wurde aus drei ebenen Plexiglasplatten gefertigt, was einer Fortführung des annähernd dreieckigen Querschnitts der Filtertasche entspricht.

Der Strömungskanal wurde auf der Abströmseite an ein Gebläse zur Induzierung einer Saugströmung angeschlossen. Die Schlauchverbindung wurde mit einer Heißfilmsonde zur Messung des Luftmassenstroms (*Bosch HFM Typ 9.3*) ausgestattet. Die Einstellgenauigkeit des Gebläses lag bei 0,1 kg/h. Die Querschnittsfläche in der Anströmung ist etwas größer als die im realen Filter pro Tasche zur Verfügung stehende Querschnittsfläche. Deswegen stellten sich im Experiment bei gleicher Strömungsgeschwindigkeit in der Anströmung höhere Filtrationsgeschwin-

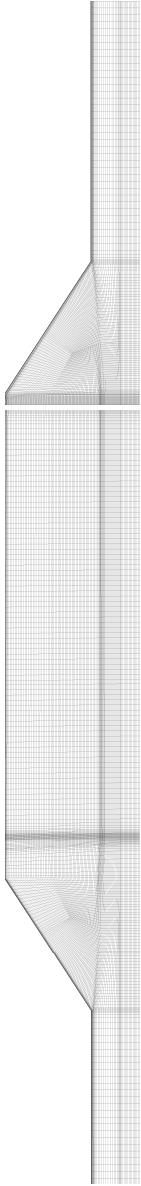


Abbildung 2.3: Rechengitter des Fluids um die Filtertasche bestehend aus ca. 1,5 Mio. Hexaedern in der Seitenansicht

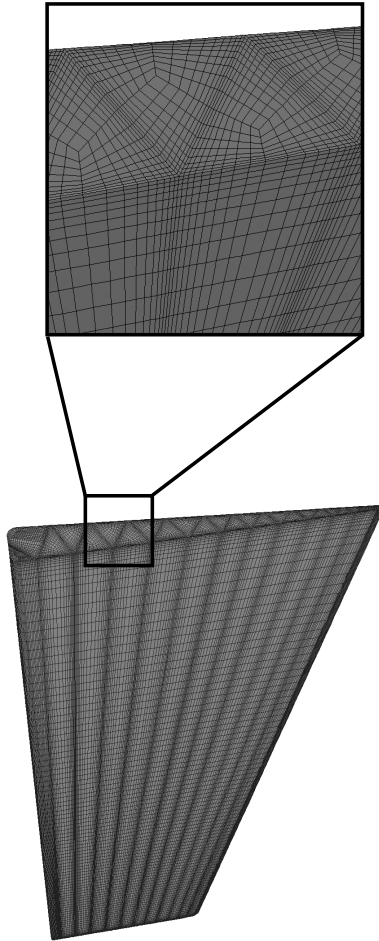


Abbildung 2.4: Rechengitter im Inneren der Filtertasche mit dem Abstandhalter bestehend aus 0,56 Mio. Hexaedern, Ansicht von der Abströmseite

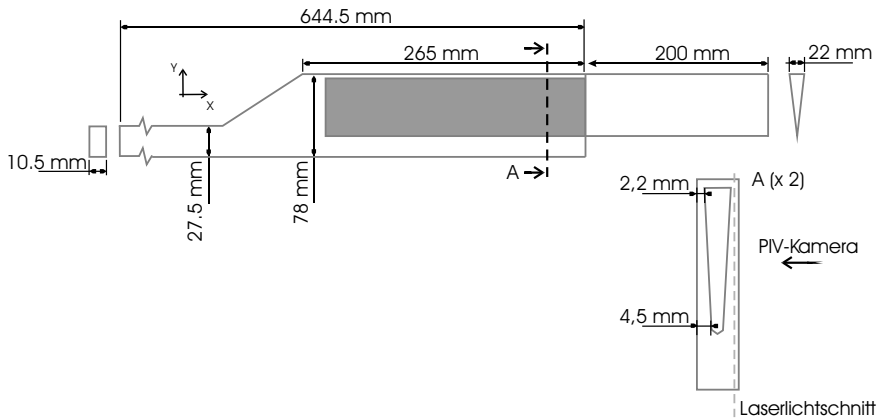


Abbildung 2.5: Geometrie des Einzeltaschenexperiments

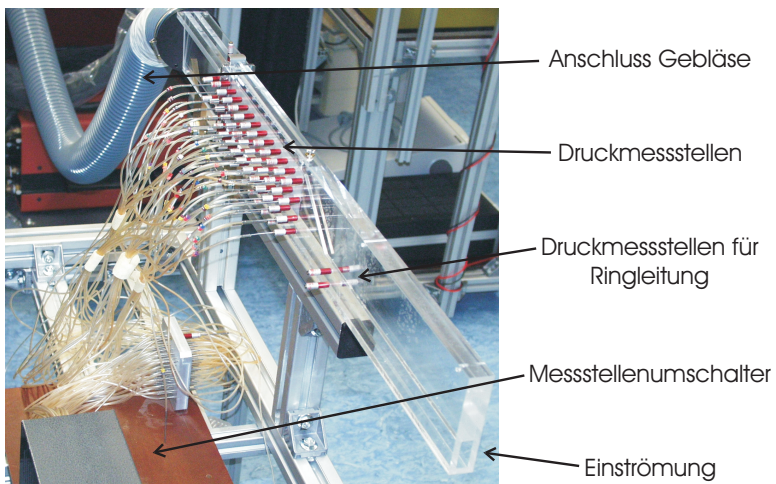


Abbildung 2.6: Aufbau des Einzeltaschenexperiments

digkeiten ein. Der Luftmassenstrom wurde so gewählt, dass die Anströmung voll turbulent ist und gleichzeitig die Filtrationsgeschwindigkeit im Bereich der unter realen Betriebsbedingungen auftretenden Werte von etwa 1-22 cm/s liegt.

Für durchströmte Kanäle des Umfangs U und der Querschnittsfläche A gilt für die mit dem hydraulischen Durchmesser $d_h = 4A/U$ gebildete *Reynolds*-Zahl

$$\text{Re}_h = \frac{|\mathbf{v}| d_h}{\nu} \quad (2.6)$$

ein kritischer Wert $\text{Re}_{\text{kritisch}} = 2300$, bis zu dem die Strömung laminar ist. Ab einem Wert von $\text{Re}_h > \text{Re}_t = 1 \cdot 10^4$ kann sicher von turbulenter Strömung ausgegangen werden (siehe z. B. [44]). Aus diesem Wert ergibt sich als minimaler Massenstrom

$$\dot{m}_{\text{min}} = \frac{\text{Re}_t U \mu}{4}, \quad (2.7)$$

bei dem sicher voll turbulente Anströmung gegeben ist. Mit den hier gewählten Abmessungen des Aufbaus und bei Umgebungstemperatur ergibt sich daraus ein Wert von $\dot{m}_{\text{min}} = 12,8$ kg/h.

In Tabelle 2.2 sind die minimalen und maximalen Werte im gesamten Betriebsbereich des DPF für die *Reynolds*-Zahl im Abgasrohr vor Partikelfilter und für die Filtrationsgeschwindigkeit sowie die entsprechenden Werte für das Strömungsexperiment bei einem Luftmassenstrom von 12 kg/h dargestellt.

	Betriebsbereich des Partikelfilters	Einzeltaschenexperiment
<i>Reynolds</i> -Zahl [-]	$3 \cdot 10^3 - 1 \cdot 10^5$	$0,95 \cdot 10^4$
Filtrationsgeschwindigkeit [cm/s]	1-22	14,3

Tabelle 2.2: *Reynolds*-Zahl im Abgasrohr und Filtrationsgeschwindigkeit im Betriebsbereich des Partikelfilters und entsprechende Werte für das Strömungsexperiment bei einem Luftmassenstrom von 12 kg/h

Abbildung 2.7 zeigt einen aus einem Simulationsergebnis bestimmten Verlauf der *Reynolds*-Zahl im Einzeltaschenexperiment entlang der Hauptströmungsrichtung, mit dem Filtertaschenende bei $x = 0$. In Gleichung (2.6) wurde zu ihrer Bestimmung als Geschwindigkeit $|\mathbf{v}|$ die flächengemittelte Geschwindigkeit in einem zur Hauptströmungsrichtung senkrechten Schnitt verwendet, als Umfang bei der Bestimmung des hydraulischen Durchmessers die Seitenlänge von äußerer Wand und Filtertasche in diesem Querschnitt. Der Verlauf veranschaulicht die erwartete Laminarisierung im Spalt zwischen Filtertasche und Seitenwand.

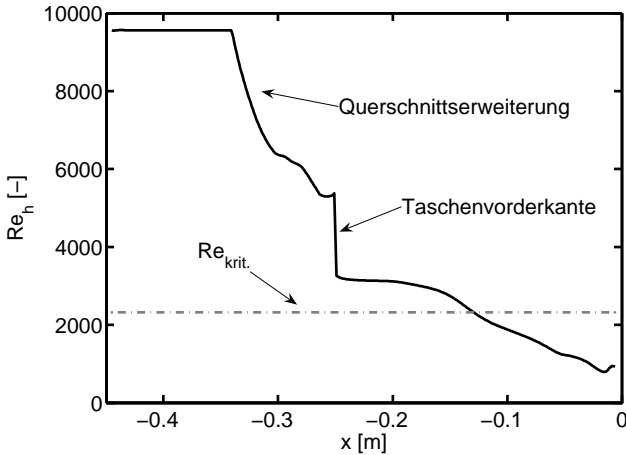


Abbildung 2.7: Verlauf der *Reynolds*-Zahl in der Hauptströmungsrichtung des Einzeltaschenexperiments

2.2.2 Messung der Geschwindigkeit

Die Messung der Geschwindigkeiten erfolgte in einer Ebene zwischen der Filtertaschenoberfläche und der Plexiglas-Seitenwand mit Hilfe der PIV-Methode (englisch *Particle Image Velocimetry*) in dem in Abbildung 2.5 skizzierten Messaufbau. Das Messsystem besteht aus dem Aerosolgenerator zur Beaufschlagung der Strömung mit sichtbaren Tracerpartikeln, dem Nd:YAG Laser (englisch *Neodimium Doped Yttrium Aluminum Garnet*, Bezeichnung des Laser-Kristalls), der Strahlführung zur Erzeugung und Orientierung des Laserlichtschnitts, der PIV-Hochgeschwindigkeitskamera, der Datenerfassung und der Datenverarbeitungs-Software. Durch zwei im Abstand von wenigen Millisekunden aufeinander folgende Laserpulse wird der Messbereich ausgeleuchtet. Zwei entsprechende Aufnahmen der Kamera enthalten bei korrekt gewähltem Pulsabstand um wenige Pixel verschobene Bilder der Tracerpartikel. Aus dieser Verschiebung werden mit der Datenverarbeitungs-Software die lokalen Strömungsgeschwindigkeiten berechnet [122]. Die zeitlich gemittelten Geschwindigkeiten ergaben sich aus den Ergebnissen von 20-50 aufeinander folgenden Messungen.

Die Verstopfung des Filtermediums durch die Traceraerosolpartikel musste bei der Durchführung der Messungen berücksichtigt werden. Aus diesem Grund wur-

de das Aerosol nur kurz während der Messungen zugegeben, und die Filtertasche bei signifikanter Abweichung des Gesamtdruckverlusts ausgebaut und im Ultraschallbad mit Aceton gereinigt.

Aufgrund der Reflexionseigenschaften des metallischen Filtermediums waren die Messwerte unmittelbar über der Tasche verwaschen. Direkte Reflexion konnte durch Subtraktion eliminiert werden, dies war jedoch nicht in ausreichendem Maße möglich für das von der Taschenoberfläche reflektierte Streulicht der Tracerpartikel. Deshalb wurde die Tasche mit Hilfe eines Schweißbrenners mit einer dünnen Schicht Ruß belegt. Die so herbeigeführte Schwärzung konnte die Reflexion so unterdrücken, dass in einem Großteil des zuvor nicht messtechnisch zugänglichen Gebiets Geschwindigkeiten ausgewertet werden konnten.

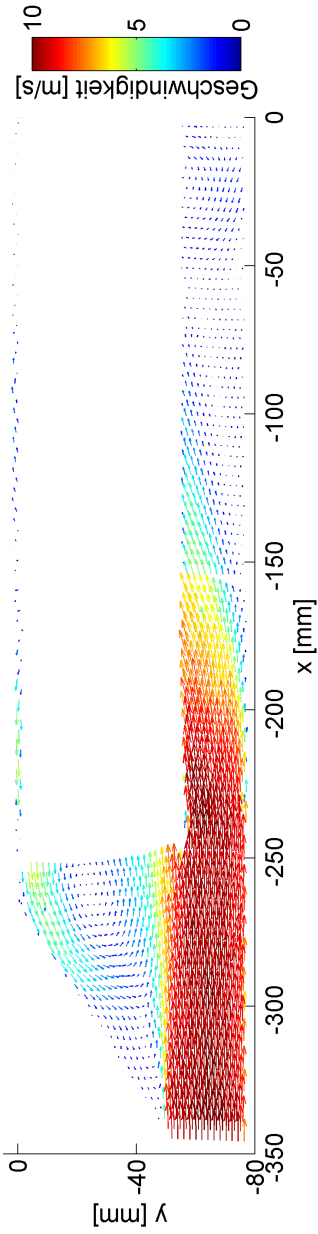
Der Vergleich der Messungen vor und nach der Schwärzung der Tasche, dargestellt in Abbildung 2.8, lässt schließen, dass die Schwärzung der Tasche keine Verfälschung des Ergebnisses bewirkt. In der Darstellung der Messergebnisse für die geschwärzte Tasche in Abbildung 2.8(b) sind noch Bereiche erkennbar, in denen eine zu schlechte Datenrate eine Auswertung der Geschwindigkeit verhinderte. Beide Messungen zeigen, dort wo ein Vergleich möglich ist, qualitativ gute Übereinstimmung. Eine detailliertere Diskussion der Ergebnisse erfolgt in Abschnitt 2.3.1 im Rahmen des Vergleichs mit Simulationsergebnissen.

2.2.3 Messung des Gesamtdruckverlusts

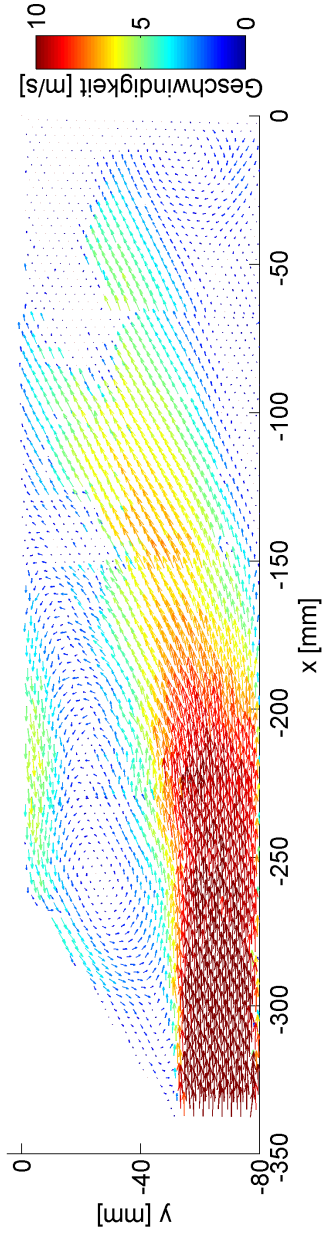
Auf der An- und Abströmseite des Strömungskanals befinden sich Druckmessbohrungen in der Kanalwand - anströmseitig vor der Querschnittserweiterung sechs, abströmseitig vier Bohrungen, jeweils in einer Ebene senkrecht zur Hauptströmungsrichtung (siehe Abbildung 2.9). Diese wurden mit Druckmessadaptern und Kapillarschläuchen zu zwei Ringleitungen verbunden, zwischen denen der Differenzdruck mit einem Differenzdrucksensor (*Sensotec Modell FDD/J258-01*, Messbereich 0-340 mbar, Unsicherheit 0,1% des Messbereichs [56]) gemessen wurde.

2.2.4 Wanddruckmessungen

In einer der Seitenwände seitlich der Filtertasche wurden 48 Druckmessbohrungen zur Messung des statischen Drucks angebracht. Gemessen wurde der Differenzdruck zur vorderen Ringleitung mit einem Differenzdrucksensor (*Special Instruments Drucksensormodul Typnummer 1786*, Messbereich +/-2 mbar, Unsicherheit 0,5% des Messbereichs [136]). In Abbildung 2.9 ist die Lage der Druckmessbohrungen eingezeichnet. Die Bohrungen sind in vier horizontalen Reihen zwischen



(a) ungeschwärzte Tasche



(b) geschwärzte Tasche

Abbildung 2.8: Ergebnis der PIV-Geschwindigkeitsmessung im Einzeltaschenexperiment für $\dot{m} = 12 \text{ kg/h}$ für geschwärzte und ungeschwärzte Tasche

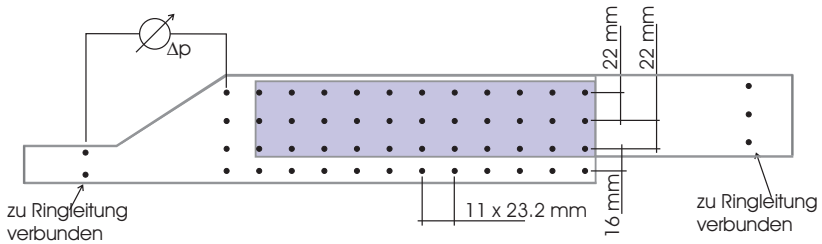


Abbildung 2.9: Lage der Druckmessbohrungen

dem Ende der Querschnittserweiterung und der Halterung der Filtertasche angeordnet, wobei die oberen drei Reihen den Zwischenraum zwischen Wand und Tasche abdecken und die untere Reihe über dem freien Strömungskanal liegt.

2.3 Simulation

2.3.1 Experimentelle Validierung des Strömungsmodells

Zur Validierung des Strömungsmodells der Filtertasche wurden Simulationsergebnisse für Geometrie und Randbedingungen des Einzeltaschenexperiments mit den Messergebnissen verglichen. Dabei wurde das Strömungsmodell in stationärer Formulierung verwendet.

Die Permeabilität des Filtermediums K in Gleichung (2.2) wurde so gewählt, dass der gemessene Differenzdruck bei einem niedrigen Massenstrom von 4 kg/h wiedergegeben wird. Der gefundene Wert von $2,77 \mu\text{m}^2$ liegt im Bereich der an unterschiedlichen Materialproben gemessenen Permeabilität von $0,5$ bis $3 \mu\text{m}^2$.

Als Turbulenzmodell wurde das k - ε -Modell mit den in Abschnitt 2.1.4 erläuterten Modifikationen eingesetzt. Die Ergebnisse der Rechnungen zeigten keine Sensitivität bezüglich der am Eintritt als Randbedingung vorgegebenen turbulenten Intensität im Bereich von 1% bis 10% . Die nachfolgend gezeigten Ergebnisse wurden mit einem Wert von 5% berechnet.

Geschwindigkeiten

Ein Ergebnis der Geschwindigkeitsmessung im Einzeltaschenexperiment für einen Massenstrom von 12 kg/h ist in Abbildung 2.10(a) dargestellt. Länge und Einfärbung der Pfeile sind proportional zum Betrag der Geschwindigkeit.

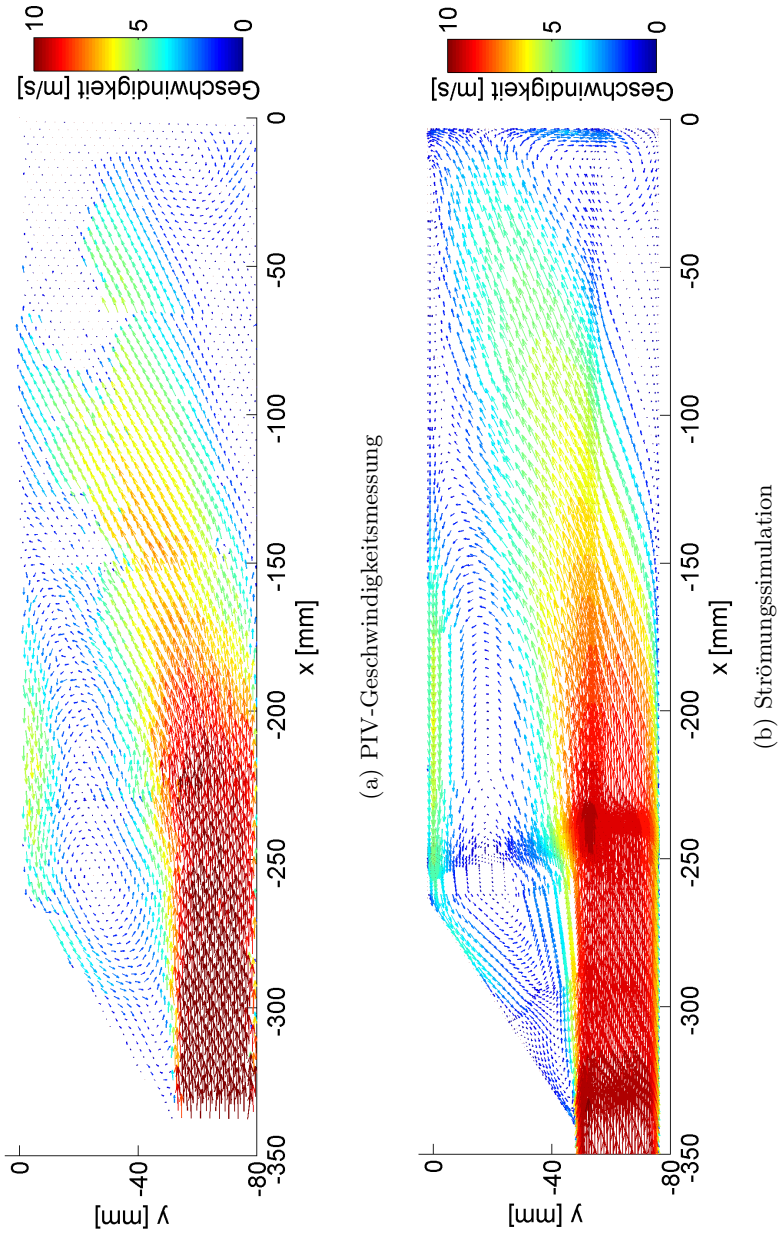


Abbildung 2.10: Vergleich von Ergebnissen der PIV-Messung und der Strömungssimulation für die Geschwindigkeit in einem Schnitt des Einzeltaschenexperiments für $\dot{m} = 12 \text{ kg/h}$

Die Strömung folgt im Bereich der Querschnittserweiterung der unteren Kanalwand und wird erst im Bereich 200 mm bis 160 mm vor der Taschenhalterung nach oben in den Spalt zwischen Tasche und Kanalwand umgelenkt. Die Filtertasche wird diagonal überströmt, wobei die Geschwindigkeit im Strömungsverlauf abnimmt. Aus dem oberen, vorderen Bereich des Taschenzwischenraums erfolgt Rückströmung in den freien Querschnitt vor der Tasche. Ein kleineres, rechtsdrehendes Wirbelgebiet ist im hinteren Teil des freien Querschnitts unterhalb der Tasche zu erkennen.

Das in Abbildung 2.10(b) dargestellte Ergebnis der Strömungssimulation zeigt qualitativ gute Übereinstimmung mit dem Messergebnis. Der Ort der Umlenkung in den Spalt zwischen Tasche und Kanalwand sowie Lage und Stärke der beiden Rezirkulationen werden wiedergegeben.

Ergänzende Ergebnisse sind in Anhang B aufgeführt.

Gesamtdruckverlust

Der Gesamtdruckverlust über die Filtertasche wird in den Ergebnissen der Strömungssimulation aus der Differenz des mittleren statischen Drucks in den beiden Messebenen stromauf und stromab der Tasche bestimmt. In Abbildung 2.11 sind diese Ergebnisse im Vergleich zu den gemessenen Werten über den Massenstrom aufgetragen. Die gute Übereinstimmung zwischen den Messergebnissen und den Ergebnissen der Strömungssimulation rechtfertigt den in Abschnitt 2.1.3 motivierten Verzicht auf einen quadratischen *Forchheimer*-Anteil in der Modellierung der Strömungsverluste im Filtermedium.

Ebenfalls aufgetragen sind die Ergebnisse von Vergleichsrechnungen mit identischem Rechengitter, jedoch ohne Berücksichtigung des Abstandshalters. Es ist zu erkennen, dass die Strömungsverluste in den durch den Abstandshalter gebildeten Kanälen signifikant zum Gesamtdruckverlust des unbeladenen Filters beitragen.

Wanddruck

Abbildung 2.12 stellt den Verlauf des statischen Drucks an der Wand für $\dot{m} = 12 \text{ kg/h}$ dar, wobei die X- und Y-Koordinaten des Diagramms jenen in Abbildung 2.10 entsprechen. Auf der Ordinate sind gemessene Werte des statischen Drucks als schwarze, verbundene Punkte aufgetragen. Charakteristisch für das gemessene Druckfeld ist der konstant hohe Druck im hinteren Teil ab 100 mm vor der Taschenhalterung und der im Vergleich niedrigere Druck vor der Taschenvorderrkante.

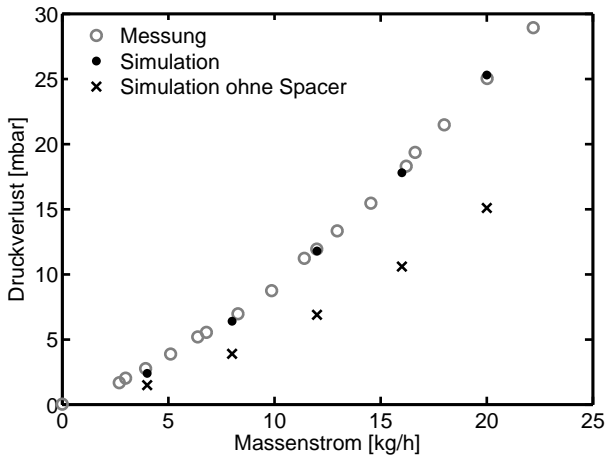


Abbildung 2.11: Vergleich der Ergebnisse für den Gesamtdruckverlust im Einzel-taschenexperiment aus Messung und Simulation

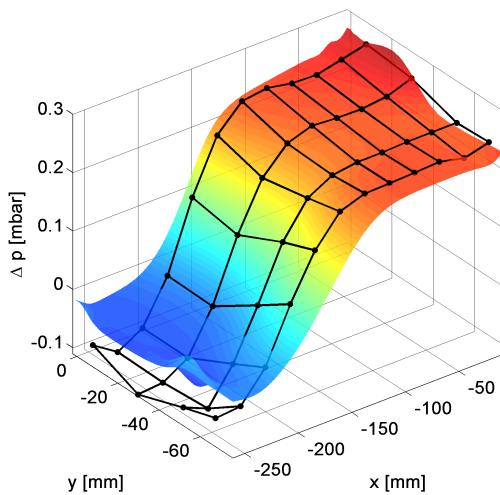


Abbildung 2.12: Vergleich der Ergebnisse für den relativen Wanddruck im Einzel-taschenexperiment aus Messung und Simulation für $\dot{m} = 12$ kg/h

Die Fläche in Abbildung 2.12 gibt das Ergebnis der Strömungssimulation wieder. Die Übereinstimmung mit dem Messergebnis ist wiederum als gut zu bewerten. Weitere Ergebnisse sind in Anhang B aufgeführt.

2.3.2 Berechnung des Strömungsfelds in der realen Filtergeometrie

Das am Einzeltaschenexperiment validierte Strömungsmodell wurde auf die in Abschnitt 2.1.1 beschriebene reale Filtergeometrie übertragen. Abbildungen 2.13 bis 2.15 zeigen exemplarische Ergebnisse der Strömungssimulation für einen Abgasmassenstrom von 110 kg/h bei 250 °C entsprechend $Re_d \approx 6900$ am Eintritt ins Rechengebiet. Es wurden dabei Isothermie und konstante Stoffwerte vorausgesetzt.

In Abbildung 2.13 ist die Umströmung der Filtertasche durch Stromlinien dargestellt. Das Abgas bildet am Eintritt des Diffusors einen Freistrah aus, der teilweise auf die Vorderkante der Filtertasche trifft. Während ein Teil des Abgasstroms hierdurch in den radial äußeren Bereich des Gehäuses umgelenkt wird, strömt der größere Teil in den freien, zylindrischen Kanal in der Filtermitte ein. Erst unmittelbar vor der Dichtplatte am Ende dieses Kanals wird die Strömung umgelenkt. Die Zweiteilung der Strömung an der Taschenvorderkante induziert so ein Zwei-Wirbelsystem auf der Taschenoberfläche. Die Abströmung hinter der Filtertasche erfolgt im Wesentlichen geschichtet, wobei sich hinter der Dichtscheibe eine Rezirkulation ausbildet.

Durch Abbildung 2.14 und Abbildung 2.15, welche das Geschwindigkeitsfeld bzw. den statischen Druck im Mittenschnitt des Rechengebiets darstellen, werden die Strömungsverhältnisse im Inneren der Filtertasche gezeigt. Im hinteren Taschenbereich ist die Strömungsgeschwindigkeit in den radial inneren Spacerkanälen höher als in den radial äußeren. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die radial innen gelegenen Kanäle einen kleineren Durchmesser und damit ein größeres Verhältnis von Filtrationsfläche zu freiem Querschnitt aufweisen. Der geringere hydraulische Durchmesser und die etwas höheren Geschwindigkeiten führen auch dazu, dass sich ein höherer Druckgradient in Hauptströmungsrichtung einstellt. Dadurch verbleibt im vorderen Bereich der radial innen gelegenen Spacerkanäle nur ein geringes treibendes Druckgefälle über das Filtermedium, weshalb in diesem Bereich wenig Fluid in die Filtertasche einströmt.

Die Druckunterschiede innerhalb der Filtertasche überwiegen deutlich gegenüber den Druckunterschieden auf der stromaufwärts gelegenen Seite des Filtermediums. Daraus lässt sich schließen, dass lokale Variationen der Filtrationsgeschwindigkeit durch das Druckfeld im Tascheninneren verursacht werden.

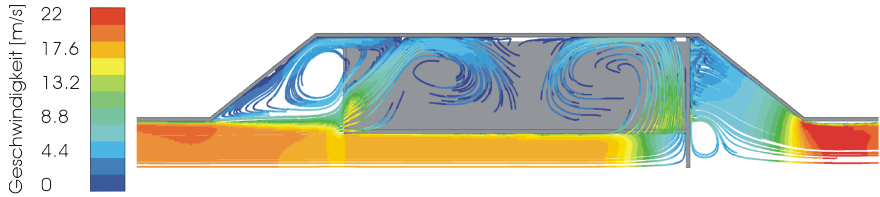


Abbildung 2.13: Umströmung der Filtertasche: Stromlinien, eingefärbt mit dem Betrag der lokalen Geschwindigkeit

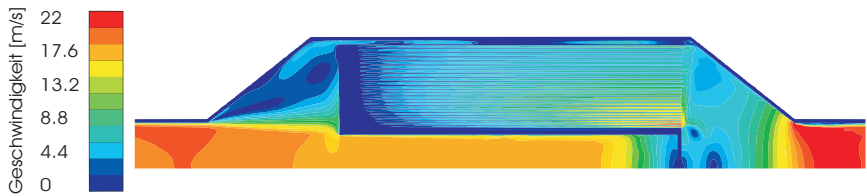


Abbildung 2.14: Geschwindigkeitsfeld im Mittenschnitt

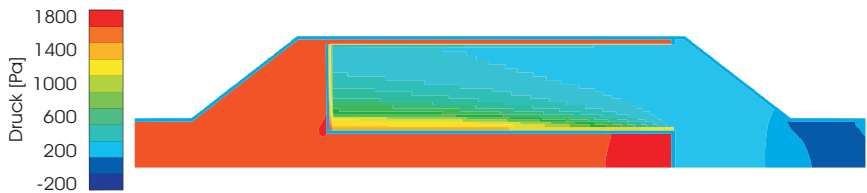


Abbildung 2.15: Statischer Druck im Mittenschnitt

2.4 Diskussion

Die Modifikation der Turbulenzmodelle ermöglicht die Berücksichtigung von turbulenten Effekten in der Anströmung der Filtertaschen, ohne dass nicht-physikalische, numerische Effekte an der Materialoberfläche das Ergebnis verfälschen. Nachteilig an der Modellierung ist die Notwendigkeit einer hohen Gitterauflösung in der Grenzschicht an der Taschenoberfläche. Ein etwa um den Faktor 10 gröberes Rechengitter wäre dann möglich, wenn das Standardwandgesetz für Oberflächen poröser Körper in geeigneter Form verwendbar wäre. Hierzu ist eine Weiterentwicklung der Strömungssimulationssoftware notwendig.

Der Einfluss des Filtermediums auf die Strömung ist ausreichend genau durch einen in der Geschwindigkeit linearen Verlustterm nach *Darcy* zu beschreiben.

Die Form des Spacers hat einen ausgeprägten Einfluss auf die Strömung und bestimmt die Strömungsverteilung auf der Taschenoberfläche wesentlich.

Durch den erfolgreichen Abgleich an dem experimentell vermessenen Eintaschenmodell kann das Strömungsmodell des Partikelfilters als validiert angesehen werden. Damit ist ein Entwicklungswerkzeug gegeben, mit dem die Auswirkung von Änderungen der Konstruktion auf die Durchströmung untersucht werden kann.

3 Numerische Berechnung des Rußschichtaufbaus im Sintermetallfilter

Für die in Kapitel 5 folgende Untersuchung der Filterregeneration ist die Kenntnis über die Verteilung des Rußes auf der Filteroberfläche eine Voraussetzung. Dabei ist insbesondere zu klären, ob sich bei einem beladenen Filter eine signifikante lokale Ungleichverteilung des Rußes einstellt. Das in Kapitel 2 vorgestellte Strömungsmodell wurde um Modellgleichungen erweitert, durch welche der Aufbau der Rußschicht auf der Filteroberfläche berechnet wird.

3.1 Modellierung

Zur numerischen Berechnung des Rußschichtaufbaus mit dem Strömungsmodell des Sintermetallfilters sind die Modellierung des Transports der Rußpartikel, ihrer Abscheidung durch das Filtermedium und des Rußschichtaufbaus sowie der Änderung des lokalen Strömungswiderstands notwendig. Zunächst wird auf die Größe und Dichte der Rußpartikel eingegangen, da diese wesentlich für ihre strömungstechnische Beschreibung sind.

3.1.1 Charakterisierung von Rußpartikeln

Partikeldurchmesser

Rußpartikel sind Agglomerate aus näherungsweise sphärischen Primärpartikeln (siehe Abschnitt 1.1.1). Zur Charakterisierung der Größe der Rußagglomerate wird meist die elektrische Mobilität angegeben, beispielsweise aus der Messung mit dem *SMPS* (englisch *Scanning Mobility Particle Sizer* [152]). Der anzahlbezogene mittlere Mobilitätswert d_m der Rußagglomerate liegt je nach Motor und Betriebspunkt zwischen etwa 60 und 120 nm. Die Partikelgrößenverteilung entspricht in etwa einer logarithmischen Normalverteilung. Anhang C enthält eine detailliertere Beschreibung der Agglomeratgrößenverteilung von Diesel-Ruß.

Zur Messung des Durchmessers der Primärpartikel d_p steht neben optischen Verfahren, wie z. B. die für Abbildung 1.2 verwendete Transmissions-Elektronen-

Mikroskopie (siehe auch [112, 155]), die LII-Methode (Laserinduzierte Glühtechnik) zur Verfügung [29, 94, 139]. In der Literatur veröffentlichte Messergebnisse von Primärpartikeldurchmessern bei Ruß liegen im Bereich von 14 nm bis 50 nm [59, 98, 112].

Agglomeratdichte

In den folgenden Ausführungen bezeichnet die Agglomeratdichte die Masse des Agglomerats bezogen auf das mit dem Mobilitätsdurchmesser gebildete Kugelvolumen:

$$\rho_{\text{agg}} = N \rho_{\text{p}} \left(\frac{d_{\text{p}}}{d_{\text{m}}} \right)^3. \quad (3.1)$$

Ein in der Literatur zur Bestimmung der Agglomeratdichte verwendeter Ansatz ist die Annahme eines fraktalen Zusammenhangs zwischen der Anzahl der Primärpartikel N und dem Mobilitätsdurchmesser mit [23, 74, 112]

$$N = k_{\text{m}} \left(\frac{d_{\text{m}}}{d_{\text{p}}} \right)^{D_{\text{f,m}}} \quad (3.2)$$

und der fraktalen Dimension $D_{\text{f,m}} = 2,35$ [112]. Für den fraktalen Vorfaktor k_{m} werden keine Werte angegeben¹. Die Agglomeratdichte ergibt sich damit zu

$$\rho_{\text{agg}} = k_{\text{m}} \rho_{\text{p}} \left(\frac{d_{\text{m}}}{d_{\text{p}}} \right)^{D_{\text{f,m}}-3}, \quad (3.3)$$

nimmt also mit zunehmender Agglomeratgröße ab.

Wang und Sorensen schlagen in [157, 158] für den Mobilitätsdurchmesser eines Agglomerats aus N Primärpartikeln den empirischen Zusammenhang

$$d_{\text{m}} = d_{\text{p}} N^{\kappa} \quad (3.4)$$

¹Experimentell nachgewiesen ist ein fraktaler Zusammenhang entsprechend Gleichung (3.2) zwischen der Anzahl N der Primärpartikel eines fraktalen Agglomerats und seinem Trägheitsdurchmesser d_{g} , dem Durchmesser des sphärischen Partikels mit dem mittleren rotatorischen Trägheitsmoment des Agglomerats, mit Werten der fraktalen Dimension $D_{\text{f,g}}$ im Bereich von 1,5-1,8 [51, 89, 98, 112, 129]. Gilt für das Fluid die Kontinuumshypothese oder ist die fraktale Dimension des Agglomerats $D_{\text{f,g}} \geq 2$, so ist nach *Schmidt-Ott et al.* [132] der Trägheitsdurchmesser proportional zum Mobilitätsdurchmesser. Streng genommen ist nur für diesen Fall ein fraktaler Zusammenhang zwischen der Anzahl der Primärpartikel und dem Mobilitätsdurchmesser nachgewiesen.

mit $\kappa = 0,44 \pm 0,03$ vor. Dieser Zusammenhang ist experimentell nur für den Grenzfall dünner Gase ($\text{Kn} \gg 1$) gesichert. Aus den Gleichungen (3.1) und (3.4) ergibt sich für die Agglomeratdichte

$$\rho_{\text{agg}} = N \rho_{\text{p}} \left(\frac{d_{\text{p}}}{d_{\text{m}}} \right)^3 = \rho_{\text{p}} \left(\frac{d_{\text{m}}}{d_{\text{p}}} \right)^{\frac{1-3\kappa}{\kappa}}. \quad (3.5)$$

Die Durchmesserabhängigkeit dieses Ansatzes stimmt mit der von Gleichung (3.3) für den berichteten Wert $D_{\text{f,m}} = 2,35$ überein.

Ein weiterer Ansatz wird von *Kim und Yuan* [68] vorgeschlagen. Aus der analytischen Bestimmung des Strömungswiderstands eines das Agglomerat repräsentierenden, porösen Ersatzpartikels wird dort der Mobilitätsdurchmesser des Agglomerats berechnet. Aus diesem Zusammenhang lässt sich die Agglomeratdichte zu

$$\rho_{\text{agg}} = k_{\text{g}} \rho_{\text{p}} \left(\frac{1}{\Omega(k_{\text{g}}, D_{\text{f,g}}) \sqrt{(D_{\text{f,g}} + 2)/D_{\text{f,g}}}} \right)^{D_{\text{f,g}}} \left(\frac{d_{\text{m}}}{d_{\text{p}}} \right)^{D_{\text{f,g}}-3} \quad (3.6)$$

ableiten, wobei Ω die Funktion aus [68] für das Verhältnis des Mobilitätsdurchmessers zum maximalen Durchmesser des Agglomerats bezeichnet.

Die Agglomeratdichte lässt sich aus der konsekutiven Messung von Mobilitäts- und aerodynamischem Durchmesser² ableiten [31, 111]. Abbildung 3.1 zeigt so für Rußpartikel ermittelte Werte aus [111] aufgetragen über dem Mobilitätsdurchmesser.³ Ebenfalls aufgetragen sind die Verläufe der Agglomeratdichte entsprechend Gleichung (3.3) nach *Park et al.* mit den Werten $D_{\text{f,m}} = 2,35$ und $k_{\text{m}} = 1$, jene nach *Wang und Sorensen* aus Gleichung (3.5) und jene nach *Kim und Yuan* aus Gleichung (3.6) mit den Werten $D_{\text{f,g}} = 1,8$ und $k_{\text{g}} = 1,23$ [42, 142].

Wie zu erkennen ist, geben die drei Ansätze die veröffentlichten Messergebnisse gut wieder. Im Folgenden wird Gleichung (3.5) zur Bestimmung der Agglomeratdichte verwendet.

²Der aerodynamische Durchmesser ist der Durchmesser des sphärischen Partikels mit der Dichte 1000 kg/m^3 , das die gleiche Sedimentationsgeschwindigkeit wie das Rußpartikel annimmt.

³Der in [111] nicht angegebene Primärpartikeldurchmesser wurde zu $d_{\text{p}} = 25 \text{ nm}$ angenommen, da sich für diesen Wert eine gute Übereinstimmung der Messwerte mit den theoretischen Vorhersagen nach den Gleichungen (3.3), (3.5) und (3.6) ergab. Für die Primärpartikeldichte wurde der Wert $\rho_{\text{p}} = 2000 \text{ kg/m}^3$ aus [74, 112] verwendet.

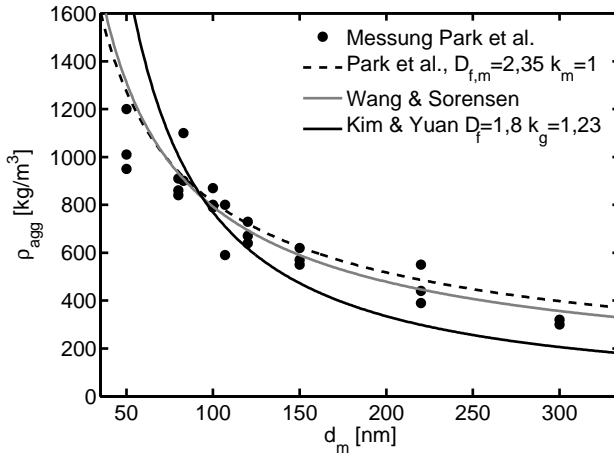


Abbildung 3.1: Agglomeratdichte von Rußpartikeln in Abhängigkeit des Mobilitätsdurchmessers, Messungen aus [111] im Vergleich mit den Ansätzen aus den Gleichungen (3.3), (3.5) und (3.6)

3.1.2 Partikeltransport

Es kann angenommen werden, dass die im Brennraum entstehenden Rußpartikel ideal dispergiert in den Diesel-Partikelfilter eingebracht werden. Entscheidend für eventuelle lokale Unterschiede im Rußschichtaufbau ist ihre Bewegung bis zur Abscheidung am Filtermedium. Sofern die Relativbewegung der Rußpartikel zur Gasphase sowie die Interaktion zwischen Partikeln vernachlässigbar sind, kann angenommen werden, dass sich die Verteilung der zu einem Zeitpunkt abgeschiedenen Rußmasse auf der Oberfläche des Filtermediums nicht von der Verteilung des Gases unterscheidet. Falls diese Annahmen nicht gültig sind, ist eine genauere Bestimmung der Partikelbahnen notwendig (siehe z. B. [33, 133]).

Eine Relativbewegung der Partikel zum Gas ergibt sich, wenn diese aufgrund ihrer Trägheit nicht in der Lage sind Änderungen der mittleren Fluidgeschwindigkeit zu folgen, oder durch *Brown'sche* Partikelbewegung. Im Folgenden wird überprüft, ob die Vernachlässigung der genannten Effekte für ein repräsentatives Rußpartikel mit $d_m = 100$ nm und einer Agglomeratdichte $\rho_{agg} = 800$ kg/m³ (siehe Abbildung 3.1) zulässig ist.

Partikelträgheit

Zur Überprüfung des Trägheitseinflusses wird nach [28] die mit der Partikelgeschwindigkeit gebildete *Stokes-Zahl* St_P betrachtet. Sie ergibt sich mit der Fluid- bzw. Partikelrelaxationszeit τ_F und τ_P zu

$$St_P = \frac{\tau_P}{\tau_F} \quad (3.7)$$

mit

$$\tau_P = \frac{\rho_{\text{agg}} d_m^2}{18\mu} \quad (3.8)$$

und

$$\tau_F = \frac{l}{|\mathbf{v}|} \quad (3.9)$$

mit einer für die Geometrie charakteristischen Länge l . Bei Annahme der Fluid-Viskosität zu $\mu = 3 \cdot 10^{-5}$ kg/ms ergibt sich für das repräsentative Rußpartikel eine Partikelrelaxationszeit $\tau_P = \mathcal{O}(10^{-8})$ s, so dass selbst für die maximal auftretenden Strömungsgeschwindigkeiten $|\mathbf{v}| = \mathcal{O}(100)$ m/s und bei Verwendung des minimalen Filtertaschenabstands $l = \mathcal{O}(1)$ mm die Vernachlässigbarkeit der Partikelträgheit mit $St = \mathcal{O}(10^{-3})$ begründet ist.

Brown'sche Partikelbewegung

Die durch Kollision mit Gasmolekülen verursachte *Brown'sche* Bewegung der Rußpartikel kann als diffusive Bewegung interpretiert werden. In [42] wird mit der mittleren Auslenkung des Partikels $\overline{\Delta x}$ im Zeitraum Δt ein Diffusionskoeffizient

$$D = \frac{\overline{\Delta x}^2}{2\Delta t} \quad (3.10)$$

gebildet, der sich nach der *Stokes-Einstein-Beziehung* zu

$$D = \frac{k_B T C u_m}{3\pi\mu d_m} \quad (3.11)$$

ergibt, wobei $C u_m$ für den mit dem Mobilitätsdurchmesser gebildeten Schlupfkorrekturfaktor steht (siehe hierzu Gleichung (5.6)). Wird als Zeitmaß die charakteristische Verweilzeit des Partikels im Zwischenraum zwischen zwei Filtertaschen der Länge l

$$\Delta t = l/|\mathbf{v}| \quad (3.12)$$

verwendet, ergibt sich die mittlere Auslenkung des Partikels aus Gleichung (3.10) und Gleichung (3.11) zu

$$\overline{\Delta x} = \sqrt{\frac{2k_{\text{B}}C_{\text{U}_m}lT}{3\pi\mu d_m |\mathbf{v}|}}. \quad (3.13)$$

Bei einer als minimal für den Filterbetrieb anzusehenden Geschwindigkeit von 1 m/s (entsprechend einer Verweilzeit in der Komponente von $\Delta t \approx 0,25$ s) und einer Temperatur von 500 °C ergibt sich eine Auslenkung eines Rußagglomerats mit $d_m = 100$ nm von $\overline{\Delta x} = \mathcal{O}(10^{-4})$ m. Der Einfluss der *Brown*'schen Partikelbewegung auf die Verteilung des Rußes auf der Taschenoberfläche kann daher vernachlässigt werden.

Partikelinteraktion

Für die Bewertung des Einflusses von Partikelkollisionen ist nach [28] die Relativgeschwindigkeit \mathbf{v}_{rel} zwischen Partikeln maßgeblich. Bei Gültigkeit der Ungleichung

$$|\mathbf{v}_{\text{rel}}| < \frac{3\mu}{d_m \overline{c_{\text{P}}}} \quad (3.14)$$

ist die Annahme gerechtfertigt, dass Partikelkollisionen keinen wesentlichen Einfluss auf die Partikelbewegung haben. Hierbei ist $\overline{c_{\text{P}}}$ die Konzentration der dispersen Phase. Für $d_m = 100$ nm ergibt sich bei Annahme der maximalen Rußkonzentration im Abgas zu 100 mg/m³ eine maximale Relativgeschwindigkeit $|\mathbf{v}_{\text{rel}}|_{\text{max}} = \mathcal{O}(10^3)$ m/s, bis zu der die Ungleichung (3.14) gültig ist. Mögliche Ursachen für Relativgeschwindigkeiten wie *Brown*'sche Partikelbewegung oder turbulente Schwankungen scheiden hierfür aus.

3.1.3 Aufbau der Rußschicht

Mit den so begründeten Annahmen ist die Zunahme der lokalen flächenspezifischen Rußbelastung m'' auf der Filteroberfläche proportional zur lokalen Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{v} und bei Verwendung des Abscheidegrades ϕ durch

$$\frac{\partial m''}{\partial t} = \phi \overline{c_{\text{P}}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \quad (3.15)$$

gegeben. Hierbei ist \mathbf{n} der in das Filtermedium gerichtete Normaleneinheitsvektor.

Die Zeitskalen der durch den Aufbau der Rußschicht bewirkten Änderung des Strömungswiderstands des Filtermediums sind deutlich größer als die Verweilzeit

des Gases im Filter. Daher ist der gesamte Beladungsvorgang durch eine Folge von stationären Strömungszuständen zu beschreiben. Mit dem Strömungsmodell des Sintermetallfilters in *Fluent* wurde das Strömungsfeld berechnet und die lokale Filtrationsgeschwindigkeit bestimmt. Die flächenspezifische Rußbeladung m'' wurde in Form eines benutzerdefinierten Speichers (englisch *user-defined memory UDM*) in einer der Filteroberfläche benachbarten Zellschicht berücksichtigt. Für die folgende Rechnung wurde eine diskrete Menge Ruß Δm proportional zur lokalen Filtrationsgeschwindigkeit auf der Filteroberfläche verteilt:

$$m''(\mathbf{x}, t + \Delta t) = m''(\mathbf{x}, t) + \phi \Delta m \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}}{V}. \quad (3.16)$$

Bei der Durchführung der Berechnungen wurde Δm so klein gewählt, dass durch eine weitere Verringerung kein Einfluss auf die Lösung bewirkt wurde. Die Änderung des Abscheidegrades ϕ bei gering mit Ruß beaufschlagter Filteroberfläche wurde vernachlässigt und dieser zu 1 angenommen.

3.1.4 Strömungswiderstand der Rußschicht

Analog zu der in Abschnitt 2.1.3 diskutierten Modellierung des unbeladenen Filtermediums lässt sich die Rückwirkung des abgeschiedenen Rußes auf die Strömung durch das *Darcy*-Gesetz modellieren. Über das flächennormal durchströmte, auf der Oberfläche mit Ruß beladene Filtermedium ergibt sich der Druckabfall zu

$$\Delta p = \frac{\mu H_{\text{SM}} |\mathbf{v}|}{K_{\text{SM}}} + \frac{\mu H_{\text{Ru}\beta} |\mathbf{v}|}{K_{\text{Ru}\beta}}, \quad (3.17)$$

wobei $H_{\text{Ru}\beta}$ und H_{SM} die Höhe und $K_{\text{Ru}\beta}$ und K_{SM} die Permeabilität der Rußschicht bzw. des Filtermediums bezeichnen. Nach Einführung der Schüttdichte

$$\rho_S = m'' / H_{\text{Ru}\beta} \quad (3.18)$$

ergibt sich

$$\Delta p = \frac{\mu H_{\text{SM}} |\mathbf{v}|}{K_{\text{SM}}} + \frac{\mu m'' |\mathbf{v}|}{(\rho_S K)_{\text{Ru}\beta}}. \quad (3.19)$$

In der Impulsbilanz des Strömungsmodells wurde der Strömungswiderstand der Rußschicht nach Gleichung (3.19) berücksichtigt. In einer der Filteroberfläche benachbarten Zellschicht, in welcher die flächenspezifische Rußbeladung m'' als *UDM* verfügbar ist, wurde der Quellterm \mathbf{S} in Gleichung (2.1) modifiziert. Da die Höhe der Rußschicht nicht diskretisiert wird, \mathbf{S} aber volumenspezifisch formuliert

ist, erfolgte eine Umrechnung mit dem Durchmesser der wandnächsten Zelle in wandnormaler Richtung H_{Zelle} , so dass

$$\mathbf{S} = - \left(\frac{1}{K_{\text{SM}}} + \frac{m''}{H_{\text{Zelle}} (\rho_{\text{S}} K)_{\text{Ru}\beta}} \right) \mu \mathbf{v}. \quad (3.20)$$

Der Strömungswiderstand der Rußschicht $(\rho_{\text{S}} K)_{\text{Ru}\beta}$ kann experimentell durch Vergleich des berechneten mit dem gemessenen Differenzdruck bestimmt werden. Er hängt von der Größe der Rußpartikel und der Porosität der Rußschicht ab. In Anhang E sind theoretische Untersuchungen dargestellt, welche auf der experimentellen Vermessung der Permeabilität von Rußschichten basieren, die aus Ruß mit verschiedenen mittleren Agglomeratdurchmessern bei unterschiedlicher Filtrationsgeschwindigkeit erzeugt wurden. Da jedoch Messwerte des Differenzdrucks für den Sintermetallfilter mit motorischem Diesel-Ruß vorlagen, wurde für die im Folgenden dargestellten Ergebnisse davon abgesehen, diese Erkenntnisse in das Strömungsmodell zu übertragen.

3.2 Berechnung des Rußschichtaufbaus auf einer Filtertasche

Im Strömungsmodell des Sintermetallfilters wurde mit der beschriebenen Modellierung der Rußschichtaufbau simuliert. Als Randbedingungen und zur Bestimmung des Strömungswiderstands der Rußschicht wurden Messergebnisse aus einem Versuch am Motorprüfstand verwendet.

In diesem Versuch wurde ein Sintermetall-DPF an einem PKW-Motor mit vorgeschaltetem Oxidationskatalysator bei konstantem Drehmoment von 70 Nm und bei einer Geschwindigkeit von 2000 Umdrehungen/min etwa 10 Stunden lang beladen. Dabei ergab sich ein Abgasmassenstrom von 105 kg/h bei einer Temperatur stromauf des Filters von 280 °C. Durch Wägung vor und nach dem Versuch wurde die insgesamt eingelagerte Rußmenge zu 53,7 g bestimmt.

Abbildung 3.2 zeigt die Entwicklung des gemessenen Differenzdrucks über den Filter. Der Strömungswiderstand der Rußschicht $(\rho_{\text{S}} K)_{\text{Ru}\beta}$ wurde im Strömungsmodell so gewählt, dass sich eine gute Übereinstimmung mit dem Messergebnis ergab. In Abbildung 3.2 sind die Ergebnisse der numerischen Strömungsberechnung für den Differenzdruck über das Rechenggebiet mit $(\rho_{\text{S}} K)_{\text{Ru}\beta} = 1,8 \cdot 10^{-12} \text{kgm}^2/\text{m}^3$ aufgetragen.

In Abbildung 3.3 ist die Rußmassenverteilung auf der Filteroberfläche für eine mittlere Beladung von 0,1 g/m² dargestellt. Diese Rußmassenverteilung ergibt

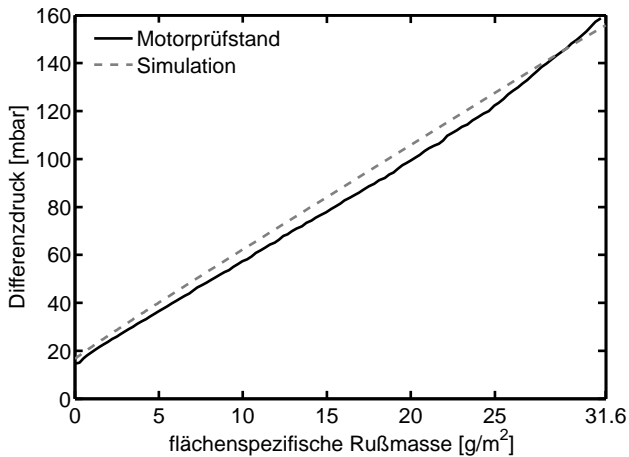


Abbildung 3.2: Vergleich der Ergebnisse für den Differenzdruck bei Beladung aus Messung und Simulation

sich aus der lokalen Filtrationsgeschwindigkeit auf der Oberfläche der unbeladenen Filtertasche. Der vordere, radial innen gelegene Bereich der Filtertasche wird aufgrund des höheren Drucks im Inneren der Tasche schlechter durchströmt und daher mit weniger Ruß beaufschlagt. Der Spacer zeichnet sich deutlich im Rußprofil ab.

Mit zunehmender Beladung steigt der Strömungswiderstand der bevorzugt beladenen Bereiche der Filteroberfläche relativ zu den weniger beladenen, wodurch die Durchströmung vergleichmäßigt wird. Diese Selbstheilung zeigt sich im weiteren Aufbau der Rußschicht, welcher in den Abbildungen 3.4 bis 3.8 dargestellt ist.

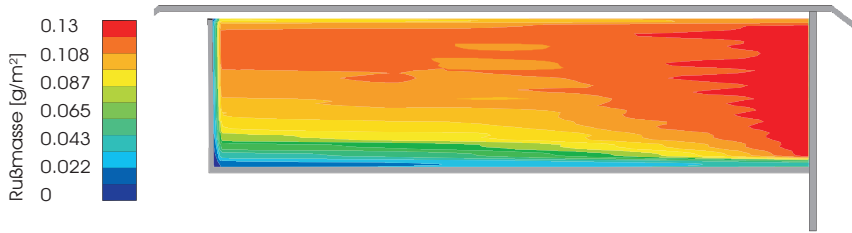


Abbildung 3.3: Rußmassenverteilung auf der Filteroberfläche bei einer mittleren Beladung von $0,1 \text{ g/m}^2$

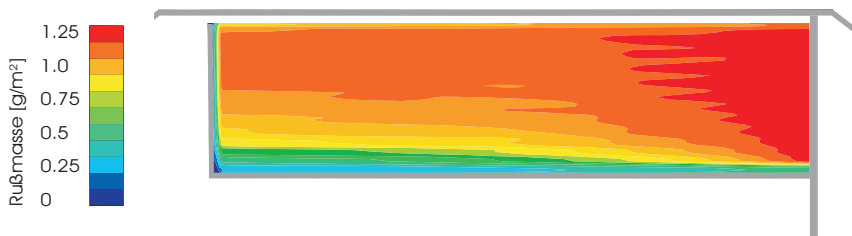


Abbildung 3.4: Rußmassenverteilung auf der Taschenoberfläche bei einer mittleren Beladung von 1 g/m^2



Abbildung 3.5: Rußmassenverteilung auf der Taschenoberfläche bei einer mittleren Beladung von 5 g/m^2



Abbildung 3.6: Rußmassenverteilung auf der Taschenoberfläche bei einer mittleren Beladung von 10 g/m^2

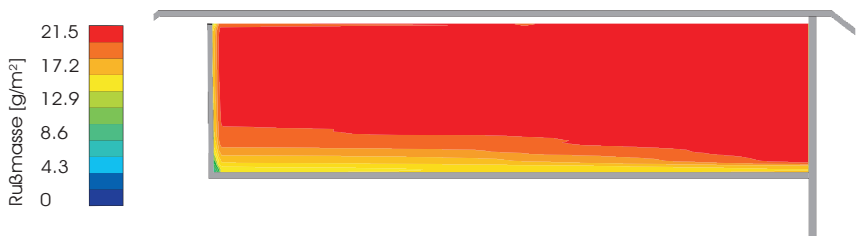


Abbildung 3.7: Rußmassenverteilung auf der Filteroberfläche bei einer mittleren Beladung von 20 g/m^2



Abbildung 3.8: Rußmassenverteilung auf der Filteroberfläche bei einer mittleren Beladung von 30 g/m^2

In Abbildung 3.9 ist die Verteilung der normierten Filtrationsgeschwindigkeit v_f/\bar{v}_f über dem kumulierten Flächenanteil aufgetragen. Für eine mittlere Rußbelastung von $0,1 \text{ g/m}^2$ weist das am wenigsten durchströmte Flächenelement nur 20% der mittleren Filtrationsgeschwindigkeit auf, das maximal durchströmte dagegen 125%. Die Vergleichmäßigung der Filtrationsgeschwindigkeit ist aus den flacheren Verläufen bei höherer Rußbelastung zu erkennen.

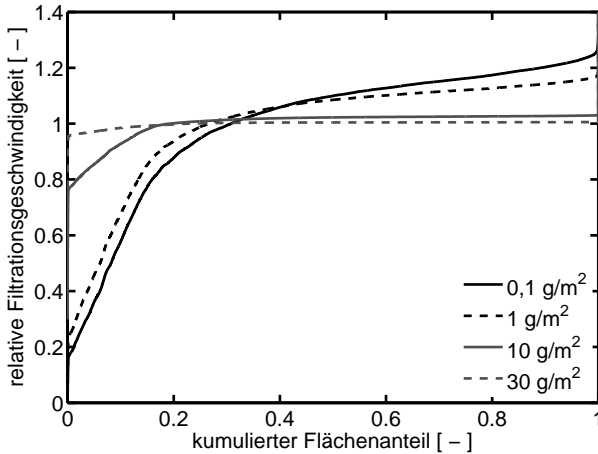


Abbildung 3.9: Gleichmäßigkeit der Filtrationsgeschwindigkeit bei fortschreitender Rußbelastung

Abbildung 3.10 zeigt die entsprechenden Verläufe für die relative, flächenspezifische Rußbelastung m''/\bar{m}'' . Da die Rußmasse erhalten bleibt, welche zu Beginn der Beladung eingelagert wird, schreitet die Vergleichmäßigung der Rußbelastung langsamer voran als jene der Filtrationsgeschwindigkeit.

3.3 Diskussion

Der Aufbau der Rußschicht auf der Oberfläche des Sintermetall-Filters lässt sich durch das dargestellte, einfache Beladungsmodell berechnen. Da der Beladungsvorgang durch eine Folge quasistationärer Strömungsfelder beschrieben werden kann, ist der Rechenaufwand vergleichsweise gering. Wie die Abschätzungen in Abschnitt 3.1.2 zeigen, ist eine Berechnung der Bahnen repräsentativer Einzelpartikel zur Untersuchung der Rußschichtaufbaus nicht notwendig. Erst wenn Abl-

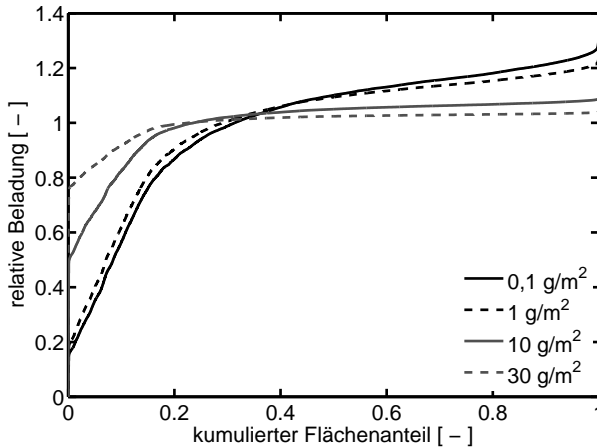


Abbildung 3.10: Gleichmäßigkeit der fortschreitenden Rußbeladung

gerungsstrukturen auf kleineren Skalen aufgelöst werden, so etwa die Abscheidung von Ruß innerhalb des Filtermediums, muss diese Vereinfachung aufgegeben werden.

Die Ergebnisse der Simulation des Rußschichtaufbaus zeigen, dass bei niedriger Rußbeladung eine deutliche Ungleichverteilung des Rußes auf der Filteroberfläche vorliegt. In diesem Zustand ist der Strömungswiderstand der Spacerkanäle noch signifikant gegenüber jenem des Filtermediums und der dünnen Rußschicht. Da gleichzeitig der Strömungswiderstand im Spalt zwischen zwei Taschen gering ist, ergibt sich eine bevorzugte Durchströmung des Filters im hinteren Bereich in der Nähe der Dichtscheibe. Hieraus ist zu folgern, dass eine Variante mit geringem Spaltmaß zwischen den Taschen, also mit mehr Filtertaschen, bezüglich der Gleichmäßigkeit des Rußschichtaufbaus zu bevorzugen wäre.

Bei hohen Beladungen bewirkt die Selbstheilung eine Vergleichmäßigung der Rußschichtdicke. So wiesen bei 30 g/m^2 mittlerer Rußbeladung nur 10% der Filteroberfläche weniger als 90% der mittleren Beladung auf. Für die folgenden Untersuchungen der Filterregeneration wurde diese Ungleichverteilung daher zunächst vernachlässigt.

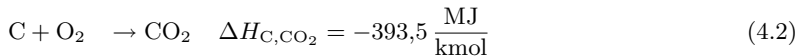
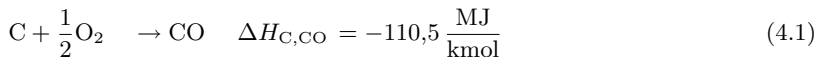
4 Experimentelle Untersuchung und Modellierung der Abbrandrate der Rußschicht

Zur Untersuchung der Regeneration des Diesel-Partikelfilters ist ein Modell der Rußabbrandrate unter Berücksichtigung der Abhängigkeit von der Temperatur, der Sauerstoffkonzentration und der Rußmasse notwendig. Aus Messergebnissen eines Experiments mit konstanten Reaktionsbedingungen unter Verwendung von künstlichem Ruß aus einem Rußgenerator wurden ein Kinetikmodell des Rußabbrands abgeleitet und die Modellparameter bestimmt. Darüber hinaus wurde untersucht, in welcher Form die Stofftransportlimitierung der Reaktion bei hohen Reaktionsraten in der Modellierung berücksichtigt werden muss.

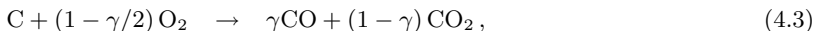
4.1 Modellierung der Abbrandkinetik der Rußschicht

4.1.1 Reaktionssystem

Diesel-Ruß besteht im Wesentlichen aus Kohlenstoff (siehe Abschnitt 1.1.1), der mit Sauerstoff zu CO und CO₂ reagiert.

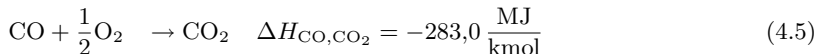


Mit der Selektivität der Reaktion zu CO, γ , lässt sich für die Gesamt-Brutto-Reaktionsgleichung schreiben:



$$\Delta H = \gamma\Delta H_{\text{C,CO}} + (1 - \gamma)\Delta H_{\text{C,CO}_2}. \quad (4.4)$$

Bei Temperaturen oberhalb von etwa 710 °C und ausreichendem Sauerstoffangebot findet am Filtermedium eine katalytische Oxidation von CO zu CO₂ statt.



An einer edelmetallhaltigen Beschichtung des Filtermediums läuft diese Reaktion bereits bei deutlich niedrigeren Temperaturen ab, so dass keine signifikanten CO-Konzentrationen am Auslass des Filters gemessen werden.

4.1.2 Reaktionsmechanismus und Reaktionsrate

Die spezifische Reaktionsrate r der Rußoxidation beschreibt in ihrer einfachsten Form die Geschwindigkeit der Rußmassenabnahme nach

$$\dot{m} = -rm. \quad (4.6)$$

Die Reaktion umfasst Adsorption des Sauerstoffs an der Oberfläche, Bildung und Reaktion von Oberflächenspezies sowie schließlich Desorption der Reaktionsprodukte CO und CO₂. Die Reaktionsbedingungen - also Temperatur und Sauerstoffkonzentration - und die Beschaffenheit des Rußes - also auch die Veränderung des Rußes während des Abbrands - haben Auswirkung auf die Reaktion und bewirken eine Änderung der Reaktionsrate und der Zusammensetzung des Produktgases. Eine vollständige Beschreibung des Reaktionsmechanismus mit Einzelreaktionen existiert nicht, vor allem aufgrund der noch unzulänglichen Beschreibbarkeit der chemischen Eigenschaften der komplexen Rußoberfläche (siehe Abschnitt 1.1.1).

Abhängigkeit der Reaktionsrate vom Abbrandfortschritt

Die spezifische Oberfläche und die chemischen Eigenschaften der Rußpartikel ändern sich mit fortschreitendem Abbrand. In der Literatur werden Modelle für die Entwicklung der spezifischen Oberfläche bei Rußoxidation oder -Vergasung vorgeschlagen (z. B. [15, 16, 125]). Messungen der spezifischen Oberfläche über das Stickstoff- oder CO₂-Adsorptionsvermögen bei fortschreitendem Abbrand zeigen jedoch, dass die Reaktionsrate und die spezifische Oberfläche nicht zueinander proportional sind [121].

In verschiedenen Veröffentlichungen wurde untersucht, ob eine Abhängigkeit der Reaktionsrate von Anteilen der Oberfläche mit speziellen Adsorptionseigenschaften bezüglich CO vorliegt, der sogenannten *aktiven* [120, 121] oder *reaktiven* [95, 164] Oberfläche. Ein eindeutiger Zusammenhang konnte nicht festgestellt werden. Zum jetzigen Kenntnisstand unterscheidet sich eine Modellierung der Oberfläche oder von Oberflächenspezies kaum von einer phänomenologischen Modellierung der Abhängigkeit der Reaktionsrate von der Rußmasse [95]. Ein in diesem

Sinne von *Neeft et al.* [108] verwendeter Ansatz ist die Einführung einer Ordnung q der Reaktion bezüglich der Rußmasse, so dass

$$\dot{m} = -rm_0 (m/m_0)^q \quad (4.7)$$

mit der Rußmasse zu Beginn der Reaktion m_0 und $q \approx 2/3$.

Du et al. [37] verwenden einen Zusammenhang für die Entwicklung der spezifischen Oberfläche, dessen Form auch phänomenologisch für die Veränderung der Reaktionsrate mit fortschreitendem Abbrand verwendet werden kann [66, 114].

$$\dot{m} = -r \left(1 - z_1 e^{-z_2 X} \right) m \quad (4.8)$$

Hierbei sind $X = 1 - m/m_0$ der Abbrandfortschritt sowie z_1 und z_2 Modellparameter.

In Abschnitt 4.2 wird experimentell untersucht, welcher Modellansatz zur Beschreibung der Abhängigkeit der Reaktionsrate vom Abbrandfortschritt geeignet ist.

Abhängigkeit der Reaktionsrate von der Sauerstoffkonzentration

Um die Abhängigkeiten der Reaktionsrate von der Sauerstoffkonzentration zu beschreiben, werden in der Literatur diverse vereinfachte Reaktionsmechanismen vorgeschlagen [3, 37, 93, 102]. Eine Gemeinsamkeit dieser Mechanismen ist die Berücksichtigung eines oder mehrerer Oberflächenkomplexe, die durch Desorption oder Reaktion mit Sauerstoff aus der Gasphase CO und CO₂ bilden.

Ein Mechanismus mit nur einem Oberflächenkomplex C(O) wird von *Hurt und Calo* in [58] vorgeschlagen und soll hier exemplarisch gezeigt werden. Die wesentlichen Reaktionsgleichungen sind:



Die Reaktionsrate ergibt sich aus der Kinetik der Einzelreaktionen zu

$$r = \frac{k_1 k_2 P_{\text{O}_2}^2 + k_1 k_3 P_{\text{O}_2}}{k_1 P_{\text{O}_2} + k_3/2} \quad (4.12)$$

mit dem Partialdruck von Sauerstoff P_{O_2} und den Reaktionskoeffizienten k_i . Selbst für diesen vergleichsweise einfachen Reaktionsmechanismus ergibt sich ein Zusammenhang für die Reaktionsrate, der die Bestimmung vieler Einzelparameter

und ihrer Abhängigkeit von z. B. der Temperatur erfordert. Es ist daher üblich, einfachere Ausdrücke für die Reaktionsrate zu verwenden und in einem eingeschränkten Reaktionsbereich zu parametrieren. Die beiden im Wesentlichen verwendeten Ausdrücke sind die *Eley-Rideal*-Reaktionsrate (z. B. in [2, 57, 58, 93]) mit

$$r = \frac{k_A P_{O_2}}{1 + k_B P_{O_2}} \quad (4.13)$$

und die allgemeine Reaktion n -ter Ordnung (z. B. in [37, 107, 108, 137]) mit

$$r = k P_{O_2}^n, \quad (4.14)$$

wobei die spezifische Oberfläche in den Reaktionskoeffizienten k_i enthalten ist. *Du et al.* geben in [37] die Ordnung mit $n = 0,83$ an, *Neeft et al.* in [108] mit dem ungewöhnlich niedrigen Wert $n = 0,65$. Häufig wird eine Abhängigkeit erster Ordnung mit $n = 1$ gewählt, so in [10, 19, 27, 49, 55, 71, 79, 91, 96].

In der Literatur finden sich sowohl Abbrandmodelle mit Bezug auf molare Konzentration - also Partialdruck oder Molenbruch - wie in [10, 26, 58, 91, 108, 144], als auch solche mit Bezug auf massenbezogene Konzentration - also Partialdichte oder Massenbruch - wie in [8, 14, 18, 19, 43, 55, 79, 93, 103, 113, 137, 165]. In Abschnitt 4.2 wird die Ordnung der Rußoxidation bezüglich des Sauerstoff-Partialdrucks entsprechend Gleichung (4.14) in experimentellen Untersuchungen bestimmt.

Abhängigkeit der Reaktionsrate von der Temperatur

Die Temperaturabhängigkeit des Reaktionskoeffizienten k aus Gleichung (4.14) wird mit dem *Arrhenius*-Ansatz erfasst:

$$k = k_0 e^{-E_A/R_u T}. \quad (4.15)$$

In der Literatur veröffentlichte Werte für die Aktivierungsenergie E_A der Reaktionsrate liegen im Bereich 100-180 kJ/mol (siehe z. B. [58, 93, 137]).

In Abschnitt 4.2 werden die Aktivierungsenergie und der Stoßfaktor k_0 der Rußoxidation in experimentellen Untersuchungen bestimmt.

4.2 Experimentelle Bestimmung der Parameter des Kinetikmodells

Um die Modellparameter des Kinetikmodells zum Rußabbrand zu bestimmen, wurden Experimente in einem Versuchsreaktor durchgeführt. Dabei wurde auf

dem Sintermetall-Filtermedium durch Filtration Ruß abgeschieden und bei kontrollierten Reaktionsbedingungen abgebrannt. Die Reaktionsrate wurde durch Messung der CO- und CO₂-Konzentration am Auslass des Reaktors bestimmt.

In der Literatur veröffentlichte Kinetikparameter - insbesondere für die Aktivierungsenergie E_A - beruhen meist auf Messungen der Reaktionsrate unter kontinuierlicher Steigerung der Temperatur (englisch *temperature programmed oxidation TPO*, siehe z. B. [96, 107, 166]). Da jedoch während eines Versuches die Rußmasse abnimmt und sich die spezifische Oberfläche und die chemischen Eigenschaften des Rußes ändern, sind diese Ergebnisse ungenau und theoretisch nur bei unendlich schneller Aufheizung exakt [165]. Desweiteren ist die Abhängigkeit der Reaktionsrate vom Abbrandfortschritt aus diesen Experimenten nicht zu bestimmen.

Aus diesem Grund wurde für die Abbrandexperimente eine isotherme Temperaturführung gewählt. Aus der zeitlichen Änderung der Reaktionsrate während eines Versuches wurde auf die Abhängigkeit der Reaktionsrate vom Abbrandfortschritt geschlossen. Die übrigen Abhängigkeiten wurden durch Variation der Versuchsparameter ermittelt.

Bei der Untersuchung der Kinetik einer Reaktion ist sicherzustellen, dass die Reaktionsgeschwindigkeit nicht durch die Geschwindigkeit des Stofftransports limitiert wird. Deshalb wurde bei den Versuchen zur Bestimmung der Kinetikparameter zum einen sichergestellt, dass durch eine Änderung des Gasmassenstroms bzw. der Raumgeschwindigkeit keine Änderung der Reaktionsrate bewirkt wird. Weiterhin wurden nur solche Versuche betrachtet, bei denen der Abfall der Sauerstoffkonzentration am Auslass des Reaktors weniger als 20% der Sauerstoffkonzentration in der Zuströmung betrug. In Abschnitt 4.3 folgt eine eingehende Betrachtung der Auswirkung von Stofftransportlimitierung auf die Abbrandrate.

Weiterhin wurde durch Messung vor und hinter der Probe sicher gestellt, dass die Temperatur der Probe durch die Exothermie des Abbrands nicht signifikant zunahm. Wegen der hohen thermischen Masse des Reaktorkörpers und der guten Wärmeübertragung von der Probe zum Reaktorkörper (zu einem hohen Anteil durch Wärmestrahlung) war dies bis zu hohen Reaktionsraten gegeben.

4.2.1 Experimenteller Aufbau und Versuchsdurchführung

Experimenteller Aufbau

Der experimentelle Aufbau für die Abbrandexperimente besteht aus den Proben-trägern, der Vorrichtung zur Beladung der Proben mit Ruß sowie dem beheizbaren

Versuchsreaktor. Ein Fließbild des experimentellen Aufbaus ist in Abbildung 4.1 dargestellt.

Die Probenträger sind Edelstahlrahmen, in welche Proben des Sintermetall-Filtermediums so eingeschweißt wurden, dass eine quadratische Fläche mit 34 mm Kantenlänge durchströmbar ist. Durch Anbringen einer Dichtung aus keramischen Fasern zwischen Probe und Probenrahmen konnte eine ausreichende Dichtigkeit erreicht werden [11].

Die Beladungsvorrichtung ist in Abbildung 4.2 sowie in Abbildung 4.3 im Schnitt dargestellt. Die Vorrichtung ist eine Halterung für die Probenträger mit Zu- und Abführung für einen Gasstrom. An der Abströmseite wird die Vorrichtung an eine regelbare Saugpumpe zur Einstellung des Volumenstroms angeschlossen. Am Einlass wird das mit Partikeln aus dem CAST-Rußgenerator beladene Gas bei Raumtemperatur und Umgebungsdruck zugeführt. Um eine gleichmäßige Verteilung des Rußes auf der Probe sicherzustellen, wird der Gasstrom durch einen statischen Mischer geleitet, der aus 42 senkrecht zur Strömungsrichtung orientierten Stäben mit Durchmesser 3 mm besteht. Da die Probenträger vor und nach der Beladung gewogen wurden, verursachte die geringe an den Wänden der Beladungsvorrichtung und des Mixers abgeschiedene Rußmasse keinen Messfehler.

Der CAST-Rußgenerator wurde als Rußquelle gewählt, da die erzeugten Rußagglomerate Diesel-Ruß in ihren chemischen und physikalischen Eigenschaften ähnlich sind, und diese Eigenschaften sehr gut reproduziert werden können. Eine Beschreibung des Rußes und ein Vergleich zu Diesel-Ruß ist in Anhang C aufgeführt.

Der beheizbare Versuchsreaktor zur Durchführung der Abbrandexperimente ist in Abbildung 4.4 sowie in Abbildung 4.5 im Schnitt dargestellt. Der Reaktor besteht aus drei Edelstahl-Teilen, dem beheizten Ober- und Unterteil sowie einem dazwischen angebrachten Gleichrichter, welcher die Vergleichmäßigung des zugeführten Gasstroms bewirkt. Die Abdichtung zwischen den Reaktorteilen (auf der Ober- und Unterseite des Probenträgers sowie zwischen Reaktor-Unterteil und Mischer) erfolgt durch metallische C-Ring-Dichtungen, da diese über die notwendige Temperaturbeständigkeit verfügen. Der Verschluss des Reaktors erfolgt durch Schraubverbindungen sowie zusätzlich durch einen pneumatischen Zylinder, durch den die Reaktorteile gegeneinander gepresst werden. Hierdurch ist auch bei Kriechen der Schrauben bei hohen Temperaturen die Dichtwirkung der C-Ring-Dichtungen gewährleistet.

Die Zusammensetzung des Eduktgases aus Stickstoff und Sauerstoff, welche aus Druckgasflaschen bereit gestellt werden, wird durch Massenstromregler eingestellt. Das Produktgas wird der Gasanalyse zugeführt, welche aus einem CO/CO₂-

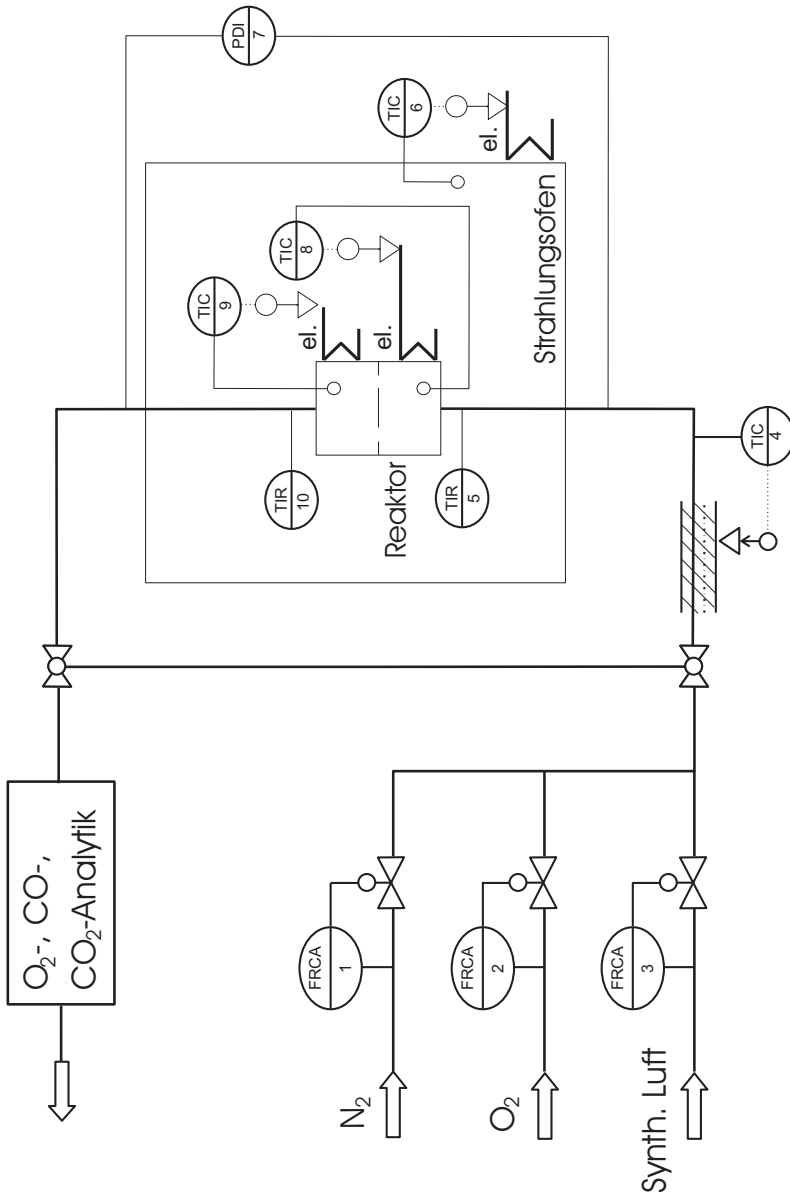


Abbildung 4.1: Fließbild des experimentellen Aufbaus zur Messung der Rußabbrandrate

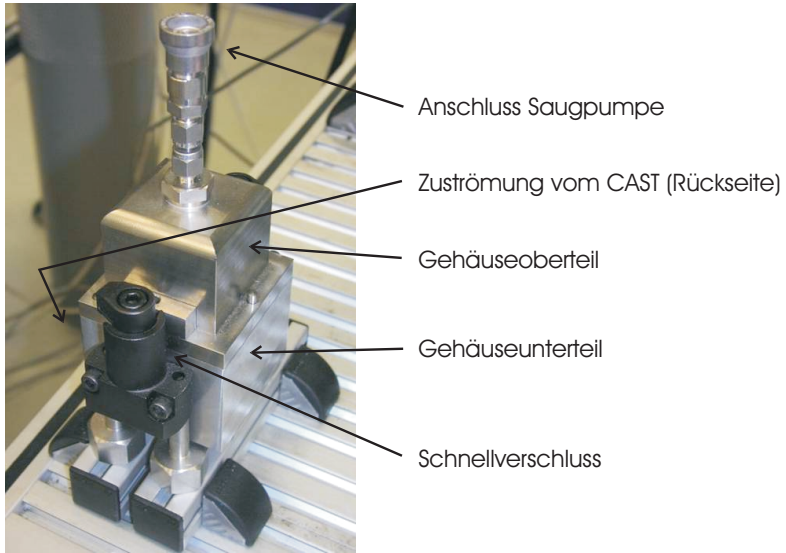


Abbildung 4.2: Vorrichtung zur Beladung der Proben mit Ruß

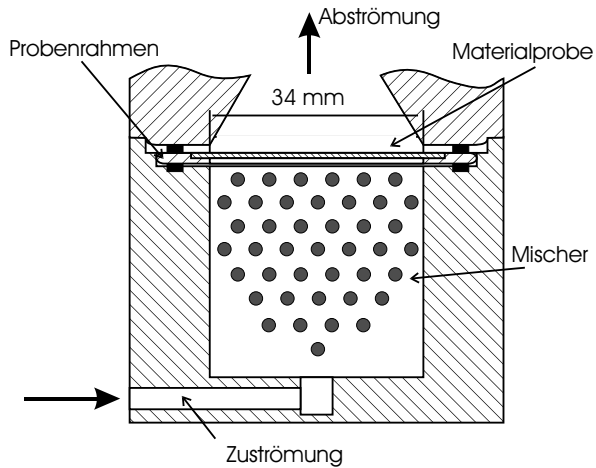


Abbildung 4.3: Schematische Darstellung der Beladungsvorrichtung im Schnitt

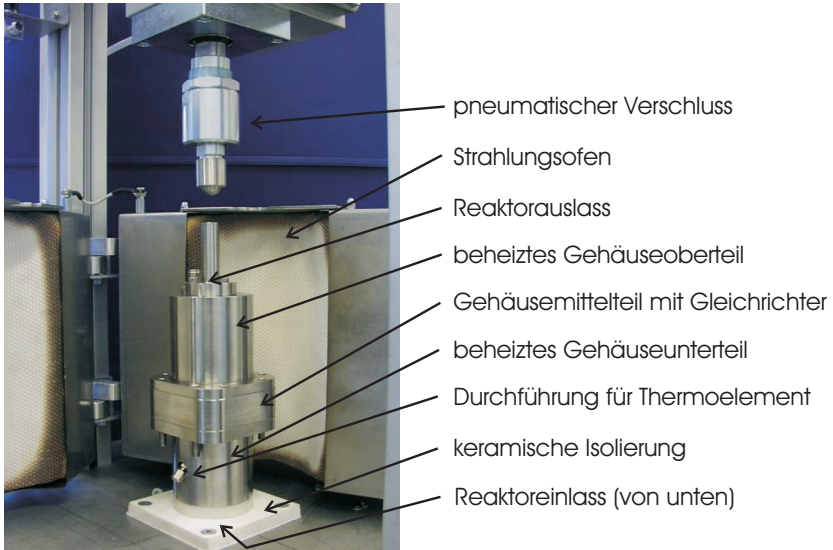


Abbildung 4.4: Versuchsreaktor zur Messung der Abbrandrate von Ruß

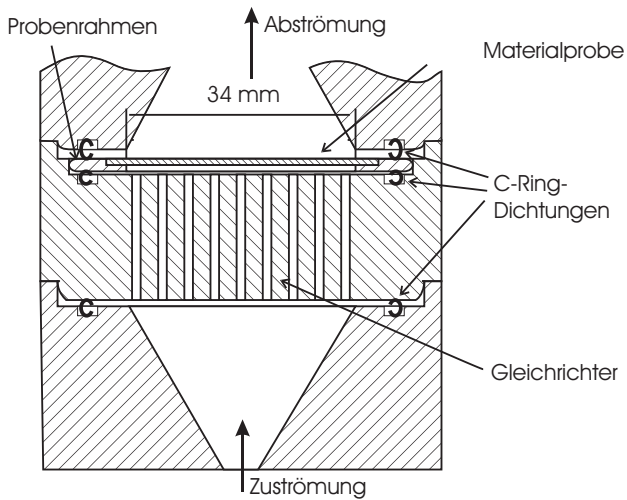


Abbildung 4.5: Schematische Darstellung des Versuchsreaktors im Schnitt

Konzentrationsmessgerät (*ABB EasyLine*, Messprinzip: Absorption im Infrarotbereich, Messbereiche: CO 0-2,5%, CO₂ 0-5,5%) und einem O₂-Konzentrationsmessgerät (*ABB Magnos*, Messprinzip: paramagnetisch, Messbereich 0-20%) besteht. Zusätzlich werden der Differenzdruck zwischen Zu- und Abströmung des Reaktors mit einem Differenzdrucksensor (*Sensotec Modell FDD/J258-01*, Messbereich 0-340 mbar, Genauigkeit 0,1% des Messbereichs [56])) sowie die Temperaturen unmittelbar stromauf und stromab der Probe durch Thermoelemente (Typ K, Durchmesser 1 mm) gemessen.

Die Beheizung des Reaktors erfolgt über 8 elektrische Hochtemperatur-Heizpatronen mit einer Heizleistung von jeweils 250 W, die sich im Reaktor-Ober- und Unterteil befinden sowie durch einen elektrischen Strahlungssofen mit einer maximalen Heiztemperatur von 1000 °C, der den Reaktor umschließt. Die Versuchstemperatur wird durch die Einsatzgrenze der Heizpatronen von 750 °C begrenzt. Der Reaktor ist durch keramische Platten vom Tisch des Versuchsstands und durch einen keramischen Zylinder vom pneumatischen Stempel thermisch isoliert. Durch die hohl ausgeführten, keramischen Isolierteile werden die elektrischen Leitungen der Heizpatronen zugeführt. Das zugeführte Gas wird vor Eintritt in den Reaktor auf eine Temperatur von 450 °C vorgeheizt.

Versuchsdurchführung

Vor Beginn des Versuchs wurde die in den Probenträger eingeschweißte Materialprobe in der Beladungsvorrichtung bei konstantem Volumenstrom mit der anschließend durch Wägung bestimmten Menge CAST-Ruß beladen. Die Durchführung der isothermen Abbrandexperimente sah zunächst das Aufheizen des Reaktors auf die stationäre Versuchstemperatur bei kontinuierlicher Spülung mit Stickstoff vor. Nach Erreichen der Versuchstemperatur wurde das CO-/CO₂-Messgerät durch Vergleich mit einer internen Kalibrierküvette kalibriert. Die Reaktion wurde durch Hinzufügen von Sauerstoff zum Eduktgas bei konstantem Gesamtmassenstrom eingeleitet. Nach dem vollständigen Abklingen des CO- und des CO₂-Signals wurde der Reaktor mit synthetischer Luft beaufschlagt, um den Sauerstoffsensor zu kalibrieren.

Durch Variation der Versuchsparameter Anfangsrußmasse, Temperatur, Gasmassenstrom und Sauerstoffkonzentration wurde in 65 Experimenten eine Datenbasis für die Bestimmung der Modellparameter erzeugt [66]. Tabelle 4.1 zeigt den Parameterraum.

Aus dem während eines Versuchs konstanten Sauerstoff- und Stickstoffvolumenstrom am Reaktoreintritt (\dot{V}_{O_2} bzw. \dot{V}_{N_2}) sowie den gemessenen Werten für

Versuchsparameter	Minimalwert	Maximalwert
Anfangsrußmasse [g/m ²]	14,9	45,6
Temperatur [°C]	581	729
Massenstromdichte [kg/m ² s]	0,005	0,046
Geschwindigkeit [m/s]	0,015	0,128
Molenbruch O ₂ [%]	2	20

Tabelle 4.1: Parameterraum für die Experimente im Versuchsreaktor

den CO- und CO₂-Molenbruch am Reaktorauslass (χ_{CO} bzw. χ_{CO_2}) ergibt sich die Reaktionsrate zu

$$\dot{m}(t) = M_{\text{C}} \frac{\dot{V}_{\text{O}_2} + \dot{V}_{\text{N}_2}}{v_{\text{mol}}} \frac{2(\chi_{\text{CO}}(t) + \chi_{\text{CO}_2}(t))}{2 - \chi_{\text{CO}}(t)}, \quad (4.16)$$

mit dem molar-spezifischen Volumen $v_{\text{mol}} = R_{\text{u}}T/p$. Durch den Korrekturfaktor $2/(2 - \chi_{\text{CO}})$ wird die Zunahme der Gasmolekülanzahl durch die Reaktion von einem Sauerstoffmolekül zu zwei Kohlenmonoxid-Molekülen berücksichtigt [11].

Die Integration von Gleichung (4.16) über die Versuchszeit liefert die abgebrannte Rußmasse. Da am Versuchsende kein Ruß auf der Probe verblieb, stellt die Differenz zur tatsächlich eingewogenen Rußmenge m_0 den Messfehler dar. Dieser wird insbesondere durch die Qualität der Dichtungen beeinflusst. Durch Verwendung neuer Dichtungen konnte der Fehler auf unter 5 % der Rußmasse reduziert werden [66].

Der mittlere Sauerstoff-Partialdruck wird in dimensionsloser Form nach

$$P_{\text{O}_2} = \chi_{\text{O}_2} \frac{p_0 + \overline{\Delta p}}{p_{\text{ref}}} \quad (4.17)$$

aus dem Sauerstoff-Molenbruch χ_{O_2} , dem mittleren Differenzdruck über den Reaktor $\overline{\Delta p}$, dem Druck am Reaktorauslass p_0 und dem Referenzdruck $p_{\text{ref}} = 1 \text{ atm}$, bestimmt.

4.2.2 Ergebnisse

Bestimmung der Parameter des Kinetikmodells

Es sollen für die freien Parameter der in Abschnitt 4.1.2 erläuterten Modellgleichungen Werte bestimmt werden, so dass durch diese die gemessene Abbrandrate wiedergegeben wird. Grundsätzlich sind hierbei zwei Vorgehensweisen möglich:

Entweder die Minimierung der Abweichung zwischen der Modellgleichung und den Messwerten in allen Versuchen und Bestimmung des globalen Optimums der Parameter oder die Bestimmung von optimalen Parametern für jeden einzelnen Versuch und Ableitung eines globalen Parametersatzes in einem zweiten Schritt. Die zweite Vorgehensweise bietet dabei den Vorteil, zusätzlich Aufschluss über eventuelle Abhängigkeiten der Modellparameter von den Versuchsbedingungen zu geben und wurde daher hier gewählt.

Zunächst wurde die gewöhnliche Differentialgleichung, welche die Rußabbrandrate beschreibt (Gleichung (4.7) bzw. Gleichung (4.8)), für geschätzte Parameter mittels eines expliziten Runge-Kutta-Verfahrens (Funktion `ode45` des *Matlab*-Programmpaketes [149]) numerisch integriert. Der resultierende Verlauf der Rußmasse über der Zeit wurde in die jeweilige Gleichung zur Berechnung der Reaktionsrate eingesetzt. Mit Hilfe eines Optimierungsalgorithmus für nicht-lineare Probleme (Funktion `lsqcurvefit` der *Optimization Toolbox* des *Matlab*-Programmpaketes [149]) wurde der Parametersatz mit der minimalen, über alle gemessenen Zeitschritte aufsummierten Abweichung

$$F = 1/m_0 \sum_t |\dot{m}_{\text{Messung}}(t) - \dot{m}(t)| \Delta t \quad (4.18)$$

für jeden Versuch ermittelt.

Abhängigkeit der Reaktionsrate vom Abbrandfortschritt

Da während der einzelnen Versuche die Versuchsbedingungen konstant waren, lässt sich aus der Änderung der Abbrandrate während des Versuchs die Abhängigkeit der Reaktionsrate vom Abbrandfortschritt bestimmen. Zur Überprüfung der Gültigkeit der beiden Ansätze für diese Abhängigkeit nach Gleichung (4.7) bzw. Gleichung (4.8) ist die Normierung der Reaktionsrate mit der spezifischen Reaktionsrate r notwendig, in welcher die Abhängigkeit von Temperatur und Sauerstoff enthalten ist. Ein Wert für r wurde für jeden Versuch mit dem oben beschriebenen Optimierungsverfahren unter Annahme der Gültigkeit von Gleichung (4.8) bestimmt.

Abbildung 4.6 zeigt den Verlauf der mit rm_0 normierten Reaktionsrate, aufgetragen über der verbleibenden Rußmasse. Dargestellt sind Mittelwert, Minimum und Maximum der Versuche. Es zeigt sich, dass zwischen der normierten Reaktionsrate und dem Abbrandfortschritt ein von den Versuchsbedingungen unabhängiger Zusammenhang besteht. Zu Beginn des Abbrands bei $m/m_0 = 1$ nimmt die Reaktionsrate zu, durchläuft ein Maximum bei $m/m_0 \approx 0,75$ und klingt zu

geringer Rußmasse hin ab. Die starke Streuung zu Beginn des Abbrands zeigte keine signifikante Abhängigkeit von den Versuchsbedingungen.

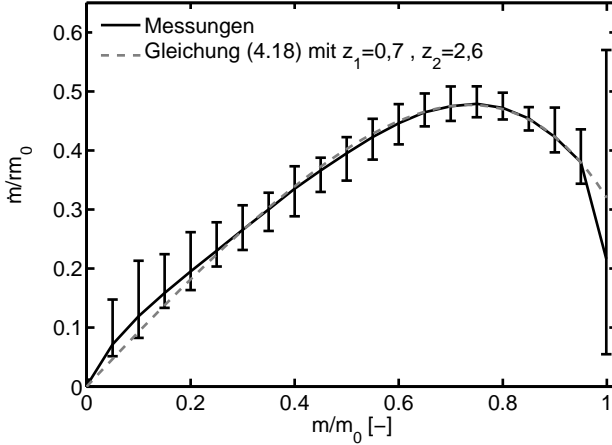


Abbildung 4.6: Abhängigkeit der Reaktionsrate vom Abbrandfortschritt

Durch einen Ausdruck nach Gleichung (4.7) mit einer konstanten Ordnung der Reaktion bezüglich der Rußmasse wird der Verlauf der Reaktionsrate nicht wiedergegeben. Gute Übereinstimmung ist dagegen mit

$$\dot{m} = -r \left(1 - z_1 e^{-z_2 X} \right) m \quad (4.19)$$

(siehe Gleichung (4.8)) mit $z_1 = 0,7$ und $z_2 = 2,6$ zu erreichen.¹

¹In [66] wurden auf der Basis eines Teils der hier dargestellten Messergebnisse ebenfalls kinetische Modellparameter für Gleichung (4.19) bestimmt. Dort wurden die Parameter z_1 und z_2 als in der Temperatur veränderlich angenommen. Bei in der Temperatur konstanten Werten ist die Übereinstimmung der Reaktionsrate mit den gemessenen Werten nur geringfügig schlechter: Die mittlere Abweichung F (siehe Abschnitt *Modellüberprüfung* auf Seite 66) steigt von 10,0% auf 11,8%. Vorteil der konstanten Modellparameter ist jedoch, dass die Temperaturabhängigkeit ausschließlich in der Aktivierungsenergie enthalten ist und sich ein einfacheres Modell ergibt.

Abhängigkeit der Reaktionsrate vom Sauerstoff-Partialdruck und von der Temperatur

Mit Gleichung (4.19) und den bestimmten Werten $z_1 = 0,7$ und $z_2 = 2,6$ wurde die Berechnung der spezifischen Reaktionsrate r jedes Versuchs mit dem beschriebenen Optimierungsverfahren wiederholt. In Abbildung 4.7 sind die ermittelten Werte logarithmisch über der reziproken Temperatur in der *Arrhenius*-Darstellung aufgetragen.

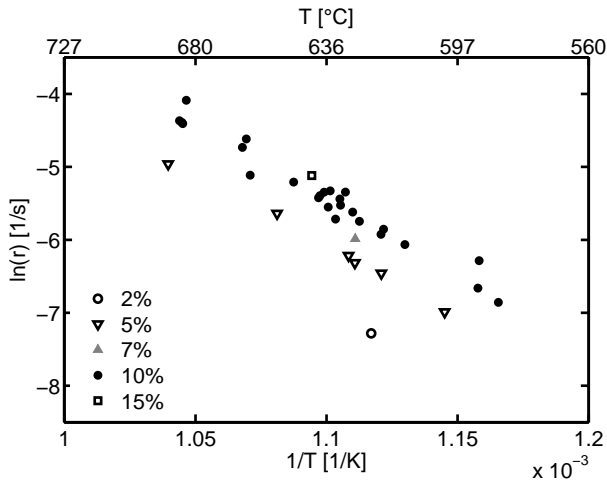


Abbildung 4.7: *Arrhenius*-Diagramm der spezifischen Reaktionsrate r für unterschiedlichen Sauerstoff-Partialdruck

Die spezifische Reaktionsrate r weist eine Abhängigkeit sowohl von der Temperatur als auch vom Sauerstoff-Partialdruck auf. Zur Korrektur für den veränderlichen Sauerstoff-Partialdruck wird entsprechend Gleichung (4.14) der Reaktionskoeffizient k mit

$$k = \frac{r}{P_{O_2}^n} = k_0 e^{-E_A/R_u T} \quad (4.20)$$

gebildet. Die Ordnung der Reaktion n wurde dabei so gewählt, dass die Abweichung der Reaktionskoeffizienten von einer Geraden in der *Arrhenius*-Auftragung minimal wird. Abbildung 4.8 zeigt die mit $n = 0,91$ bestimmten Reaktionskoeffizienten sowie die Gerade, die einer Aktivierungsenergie $E_A = 162$ kJ/mol und einem Stoßfaktor $k_0 = 7,7 \cdot 10^7$ 1/s entspricht.

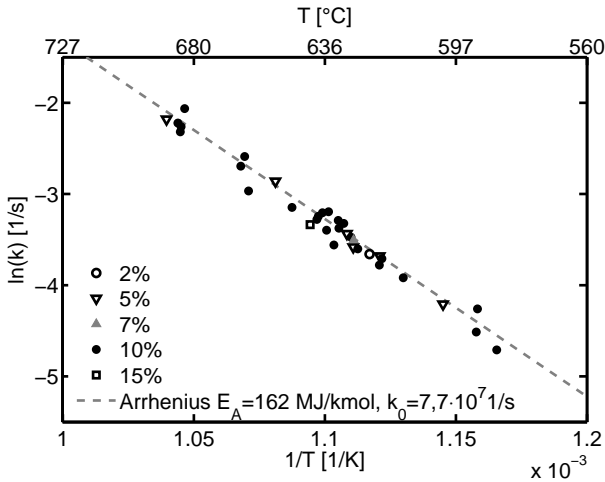


Abbildung 4.8: Arrhenius-Diagramm des Reaktionskoeffizienten k zur Bestimmung der Aktivierungsenergie und des Stoßfaktors

Die Abhängigkeit der Reaktionsrate vom Sauerstoff-Partialdruck ist in Abbildung 4.9 dargestellt. Aufgetragen ist die spezifische Reaktionsrate normiert mit dem Arrhenius-Term mit den bestimmten Werten für Aktivierungsenergie und Stoßfaktor. Die eingezeichneten Linien entsprechen $P_{O_2}^n$ für Ordnungen in Sauerstoff $n = 0,84, 0,91$ bzw. 1.

Zusammensetzung des Produktgases

In Abbildung 4.10 ist die in den Versuchen gemessene, mittlere CO-Selektivität γ der Reaktion über der Versuchstemperatur aufgetragen. Wegen der Abwesenheit von CO und CO_2 im Eduktgas ist eine Definition von γ über die mittleren Molbrüche im Produktgas nach

$$\gamma = \frac{\bar{\chi}_{CO}}{\bar{\chi}_{CO} + \bar{\chi}_{CO_2}} \quad (4.21)$$

möglich. Dargestellt sind auch Ergebnisse aus Versuchen, die bei höherer Temperatur durchgeführt wurden und bei denen kinetische Limitierung der Reaktion nicht vollständig gegeben war. Trotz der Streuung der Werte ist eine tendenzielle Zunahme der Selektivität mit steigender Temperatur zu erkennen. Oberhalb einer Temperatur von etwa $720^\circ C$ sinkt die CO-Selektivität wegen der katalytischen

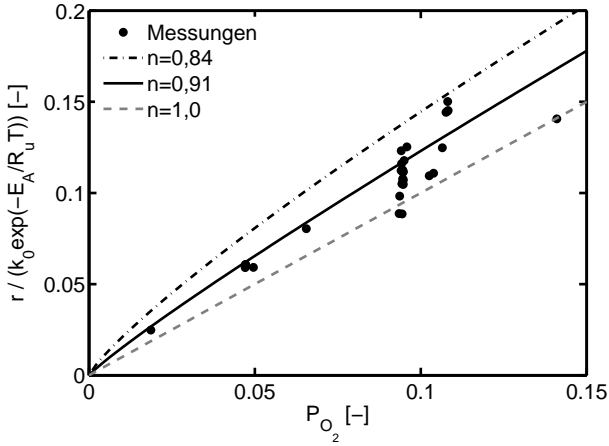


Abbildung 4.9: Auftragung der spezifischen Reaktionsrate, normiert mit dem Arrhenius-Term mit $E_A = 162 \text{ kJ/mol}$ und $k_0 = 7,7 \cdot 10^7 \text{ 1/s}$, über dem Sauerstoff-Partialdruck

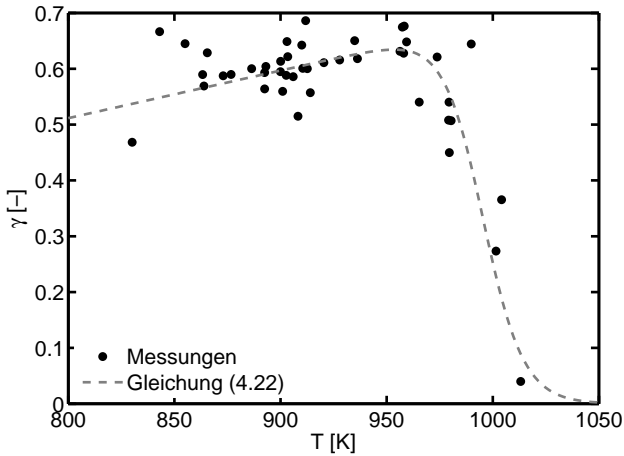


Abbildung 4.10: CO-Selektivität γ der Reaktion im Versuchsreaktor über der Versuchstemperatur

Umsetzung am Filtermedium. In einem Versuch am unbelasteten Filtermedium mit einem Gasgemisch aus Sauerstoff und CO zeigte sich eine starke Zunahme des CO-Umsatzes im gleichen Temperaturbereich.

Die Zunahme der Selektivität und das steile Abfallen lassen sich durch einen sigmoidalen Verlauf nach

$$\gamma = \frac{T - T_{\gamma,1}}{T_{\gamma,2}} \left(1 - \frac{1}{1 + e^{\left(-\frac{T - T_{\gamma,3}}{T_{\gamma,4}}\right)}} \right) \quad (4.22)$$

beschreiben. In Abbildung 4.10 ist der Verlauf mit dem niedrigsten Fehlerquadrat einer solchen Sigmoide eingezeichnet. Für sie gelten die in Tabelle 4.2 aufgeführten Werte.

$T_{\gamma,1}$	$T_{\gamma,2}$	$T_{\gamma,3}$	$T_{\gamma,4}$
200 K	1173 K	995 K	9,5 K

Tabelle 4.2: In Gleichung (4.22) verwendete Parameter für den in Abbildung 4.10 dargestellten Verlauf der CO-Selektivität

Modellüberprüfung

Die Gleichungen des kinetischen Modells der Reaktionsrate lauten zusammengefasst:

$$\dot{m} = -r \left(1 - z_1 e^{-z_2(1-m/m_0)} \right) m \quad (4.23)$$

$$r = -k_0 e^{-E_A/R_u T} P_{O_2}^n \quad (4.24)$$

Die aus den experimentellen Ergebnissen abgeleiteten Modellparameter sind in Tabelle 4.3 aufgeführt.

z_1	z_2	k_0	E_A	n
0,7	2,6	$7,7 \cdot 10^7$ 1/s	162 kJ/mol	0,91

Tabelle 4.3: Parameter des kinetischen Modells der Reaktionsrate nach den Gleichungen (4.23) und (4.24)

Die Qualität des kinetischen Modells zeigt sich zunächst in der Übereinstimmung der modellierten Reaktionsrate mit der gemessenen Reaktionsrate. Die Abweichung F nach Gleichung (4.18) war für alle Versuche kleiner als 25%. Der Mittelwert der Abweichung über alle Versuche betrug 11,8%.

Temperaturrampenexperimente wurden zu Beginn dieses Abschnitts als ungeeignet zur Parameterbestimmung bewertet. Da bei der Filterregeneration der Rußabbrand immer durch einen Temperaturanstieg eingeleitet wird, ist eine zusätzliche Überprüfung des kinetischen Modells an einem solchen Versuch wünschenswert. Abbildung 4.11 zeigt einen Vergleich der aus den Messwerten nach Gleichung (4.16) bestimmten und der aus den Modellgleichungen berechneten Abbrandrate für drei Temperaturrampenexperimente mit unterschiedlichem, konstantem Gasmassenstrom und Sauerstoffanteil im Eduktgas und unterschiedlicher Geschwindigkeit der Temperaturzunahme. Die Übereinstimmung ist mit Werten für die Abweichung F nach Gleichung (4.18) von 11,5%, 13% bzw. 14% in den drei Fällen als gut zu beurteilen.

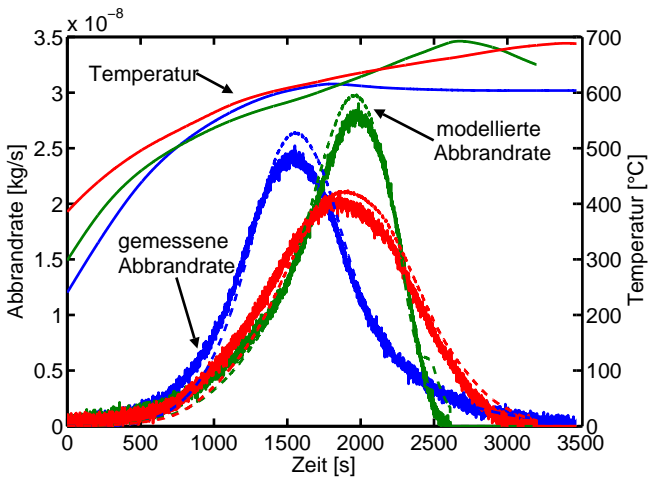
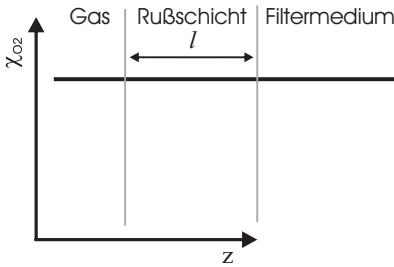


Abbildung 4.11: Vergleich zwischen Experiment und Kinetikmodell für drei Temperaturrampenversuche, die modellierten Abbrandraten sind mit gestrichelten Kurven dargestellt.

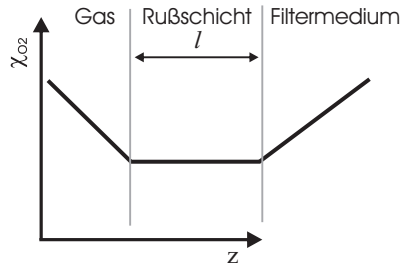
4.3 Modellierung der Stofftransporthemmung der Reaktion

Die Oxidation des Kohlenstoffs führt zu einer Verringerung der Sauerstoff-Konzentration in der Rußschicht. Bei niedriger Reaktionsrate ist diese Abnahme gering und führt nicht zu einer signifikanten Verlangsamung der Reaktion; die Reaktion

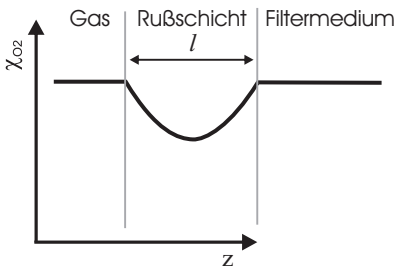
ist kinetisch limitiert [9]. Der Verlauf der Sauerstoffkonzentration in der Rußschicht ist in Abbildung 4.12(a) aufgetragen.



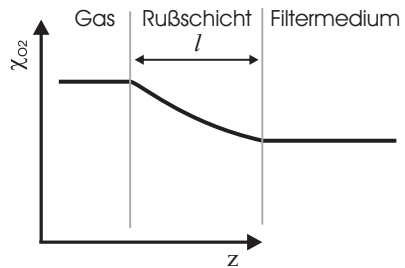
(a) kinetisch limitierte Reaktion



(b) äußere Stofftransporthemmung



(c) innere Stofftransporthemmung



(d) Stofftransporthemmung bei Konvektion als dominierendem Transportmechanismus

Abbildung 4.12: Profile des Sauerstoffanteils des Gases in der Rußschicht bei unterschiedlicher Hemmung der Reaktion durch den Stofftransport

Wird bei hoher Temperatur die Reaktionsrate so hoch, dass weniger als die reagierende Menge Sauerstoff zur Rußschicht transportiert wird, so sinkt dort die Sauerstoffkonzentration. Mit sinkendem Sauerstoffgehalt des Gases sinkt nach Gleichung (4.14) auch die Reaktionsrate, bis Stofftransport und Reaktion im Gleichgewicht stehen. Die Reaktionsrate ist durch den Stofftransport limitiert und damit niedriger, als aufgrund der Temperatur und der Sauerstoffkonzentration in der Anströmung zu erwarten wäre. In Abbildung 4.12(b) ist der Verlauf der Sauerstoff-

konzentration für äußere Stofftransporthemmung durch Diffusion zur Rußschicht skizziert.

Neben der äußeren Stofftransporthemmung ist auch eine innere Stofftransporthemmung oder Porendiffusionshemmung verbunden mit signifikanten Gradienten in der Sauerstoffkonzentration innerhalb der Rußschicht denkbar. Dieser Einfluss ist insbesondere dann von Bedeutung und setzt bei vergleichsweise niedrigen Reaktionsraten ein, wenn die Diffusionsgeschwindigkeit in der Rußschicht gegenüber jener im Gas reduziert ist und die Diffusionswege innerhalb der Rußschicht weit sind, d. h. bei großer Rußschichtdicke. In Abbildung 4.12(c) ist das Profil der Sauerstoffkonzentration in der Rußschicht für innere Stofftransporthemmung dargestellt.

Abbildung 4.12(d) zeigt schließlich das Profil der Sauerstoffkonzentration bei Stofftransporthemmung der Reaktion und Konvektion als dominierendem Transportmechanismus bzw. vernachlässigbarem Beitrag der Diffusion zum Stofftransport.

Die Stofftransporthemmung der Reaktion hat eine Auswirkung auf die Temperaturabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit. In Abbildung 4.13 sind die logarithmierten Reaktionskoeffizienten zweier Reaktionssysteme A und B über der reziproken Temperatur im *Arrhenius*-Diagramm dargestellt. Reaktionssystem A unterliegt oberhalb der Temperatur T_{A1} einer Hemmung durch äußeren Stofftransport. Eine weitere Erhöhung der Temperatur über T_{A1} führt nur in geringem Maße zu einer Zunahme der Reaktionsgeschwindigkeit. Die scheinbare Aktivierungsenergie der Reaktion ergibt sich aus der Temperaturabhängigkeit der Diffusionsgeschwindigkeit. In Reaktionssystem B liegt oberhalb von T_{B1} Hemmung der Reaktion durch inneren Stofftransport vor, oberhalb von T_{B2} Hemmung durch äußeren Stofftransport. Im Bereich $T_{B2} > T > T_{B1}$ entspricht die scheinbare Aktivierungsenergie der halben Aktivierungsenergie der ungehemmten Reaktion [9, 124].

Der lineare Verlauf im *Arrhenius*-Diagramm der gemessenen Reaktionskoeffizienten in Abbildung 4.8 zeigt, dass die Reaktion in den Versuchen zur Bestimmung der kinetischen Parameter wie angestrebt kinetisch limitiert war.

Während der Regeneration des Sintermetallfilters wird in manchen Betriebspunkten eine signifikante Absenkung der Sauerstoffkonzentration am Auslass des Filters gemessen. Ein Einfluss des Stofftransports auf den Rußabbrand ist also gegeben und muss auch durch das Strömungsmodell in Kapitel 5 berücksichtigt werden. Durch Lösung der Komponenten-Erhaltungsgleichung für Sauerstoff kann der Sauerstofftransport durch Konvektion und Diffusion zur Rußschicht - und damit auch eine äußere Stofftransporthemmung - erfasst werden. In Abschnitt 4.3.2

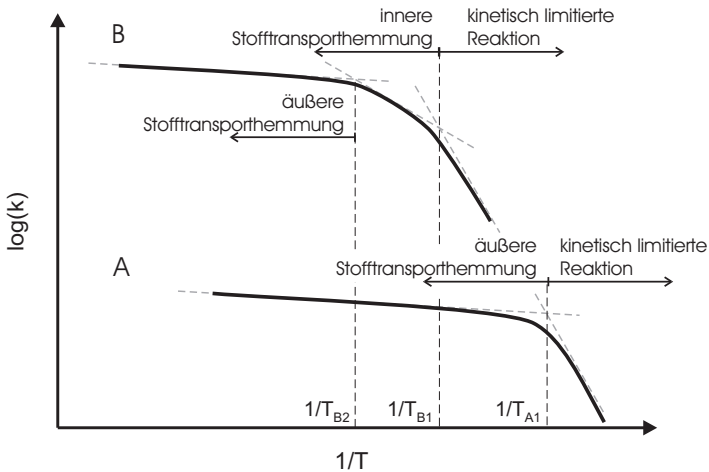


Abbildung 4.13: Arrhenius-Diagramm zweier unterschiedlich von Stofftransporthemmung beeinflusster Reaktionssysteme: Reaktionssystem A mit äußerer Stofftransporthemmung, Reaktionssystem B mit innerer und äußerer Stofftransporthemmung

wird ein vereinfachtes Modell des äußeren Stofftransports diskutiert, welches auf der Annahme vernachlässigbarer Diffusion beruht.

Falls zusätzlich innere Stofftransporthemmung vorliegt, so muss entweder die Rußschicht in dem Modell räumlich aufgelöst oder das Abbrandmodell über das kinetische Modell hinaus erweitert werden. Daher wird in Abschnitt 4.3.1 untersucht, ob im Betriebsbereich des Filters eine solche innere Stofftransporthemmung vorliegt. Die reaktionsverlangsamende, lokale Abnahme der Sauerstoffkonzentration kann dabei entweder, wie bislang beschrieben, innerhalb der Rußschicht oder innerhalb eines Rußpartikels stattfinden.

4.3.1 Überprüfung auf innere Stofftransporthemmung

Zur Beurteilung des Einflusses von Konzentrationsgradienten innerhalb einer Reaktionszone auf die Reaktionsrate dient der *Thiele*-Modul Φ , der in seiner allgemeinen Form nach

$$\Phi = l \sqrt{\frac{r}{D_{\text{eff}}}} = \sqrt{\frac{\tau_{\text{Diffusion}}}{\tau_{\text{Reaktion}}}} \quad (4.25)$$

mit der charakteristischen Länge der Reaktionszone l , der Reaktionsrate r und dem effektiven Diffusionskoeffizienten D_{eff} in Zusammenhang steht. Für sphärische Reaktionszonen mit Radius R gilt für die charakteristische Länge $l = R/3$; für scheibenförmige Reaktionszonen ist l deren Dicke H [124]. Das Quadrat des *Thiele*-Moduls ist gleich dem Verhältnis der Zeitkonstanten von Diffusion und Reaktion $\tau_{\text{Diffusion}}$ bzw. τ_{Reaktion} . Für $\Phi \ll 1$ ist die Reaktion in der Reaktionszone kinetisch limitiert. Bei größeren Werten liegt zumindest teilweise Limitierung der Reaktion durch Stofftransport vor, z. B. durch Porendiffusion [137, 146].

Für Reaktionen n -ter Ordnung mit einer spezifischen Reaktionsrate nach Gleichung (4.14) lässt sich der *Thiele*-Modul in Abhängigkeit des Partialdrucks an der Oberfläche der Reaktionszone $P_{\text{O}_2,s}$ bestimmen [124]:

$$\Phi = l \sqrt{\frac{n+1}{2} \frac{k P_{\text{O}_2,s}^{n-1}}{D_{\text{eff}}}}. \quad (4.26)$$

Die Diffusion in porösen Medien lässt sich als Superposition von molekularer Diffusion² und *Knudsen*-Diffusion beschreiben [54]. Unter Berücksichtigung der Porosität ε und der Verwindung der Diffusionswege τ_{Kn} bzw. τ_{O_2} gilt

$$D_{\text{eff}} = \varepsilon \left(\frac{\tau_{\text{Kn}}}{D_{\text{Kn}}} + \frac{\tau_{\text{O}_2}}{D_{\text{O}_2}} \right). \quad (4.27)$$

Der Diffusionskoeffizient der *Knudsen*-Diffusion D_{Kn} in einer Pore des Durchmessers d_{Pore} ist durch

$$D_{\text{Kn}} = \frac{1}{3} d_{\text{Pore}} \bar{c} \quad (4.28)$$

gegeben [22], wobei \bar{c} die mittlere Molekülgeschwindigkeit nach

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8k_{\text{B}}T}{\pi m_{\text{M}}}} \quad (4.29)$$

und m_{M} die Gasmolekülmasse bezeichnet.

Aus dem *Thiele*-Modul kann bei konstanter Temperatur in der Reaktionszone der Effektivitätsfaktor η bestimmt werden³, der das Verhältnis der tatsächlichen

²Zur Abschätzung des molekularen Diffusionskoeffizienten wird im Folgenden der binäre Diffusionskoeffizient von Sauerstoff in Stickstoff verwendet. Zu dessen Berechnung siehe z. B. [154].

³Analog zum Einfluss mikroskaliger Gradienten in der Sauerstoff-Konzentration ist auch ein Einfluss von mikroskaligen Temperaturgradienten denkbar. Wegen der Temperaturabhängigkeit der Reaktionsrate können sich so, bezogen auf die mittlere Temperatur der Rußschicht, Effektivitätsfaktoren der Rußschicht $\eta > 1$ ergeben. Für nicht-isotherme Reaktionen gibt es keinen allgemeinen, algebraischen Zusammenhang entsprechend eines *Thiele*-

Reaktionsgeschwindigkeit zur Reaktionsgeschwindigkeit bei konstanter Sauerstoffkonzentration in der Reaktionszone angibt [124, 146]. Dabei gilt für Kugeln

$$\eta = \frac{1}{\Phi} \left(\frac{1}{\tanh 3\Phi} - \frac{1}{3\Phi} \right) \quad (4.30)$$

und für scheibenförmige Reaktionszonen

$$\eta = \frac{\tanh \Phi}{\Phi}. \quad (4.31)$$

Konzentrationsgradienten in einem Primärpartikel

Stanmore et al. geben in [144] für den Durchmesser d_{Pore} der Mikroporen eines Primärpartikels einen Wert von etwa 1 nm, für seine Porosität einen Wert von 8-15% an. Unter diesen Bedingungen wird die Diffusion von Sauerstoff innerhalb des Primärpartikels durch *Knudsen*-Diffusion limitiert.

Bei Verwendung des in Abschnitt 4.2 parametrisierten Kinetikmodells zur Berechnung der Reaktionsrate r ergibt sich aus Gleichung (4.26) bei einem Primärpartikeldurchmesser von 45 nm, bei der Annahme $\tau_{\text{Kn}} = 10$ für die Verwindung der Diffusionswege⁴, bei einem Sauerstoff-Partialdruck an der Partikeloberfläche von 50 mbar (entsprechend 5% Molenbruch bei $p = 1$ bar) und einer Partikeltemperatur von 1000 °C für das *Thiele*-Modul ein Wert von $\Phi = \mathcal{O}(10^{-3})$. Aus diesem Wert kann geschlossen werden, dass der Abbrand im gesamten Partikel stattfindet und die Reaktion kinetisch limitiert ist⁵.

Konzentrationsgradienten in der Rußschicht

Als charakteristische Porengröße zur Bestimmung des *Knudsen*-Diffusionskoeffizienten in der Rußschicht nach Gleichung (4.28) verwenden *Brilhac et al.* in [22] den Durchmesser der zylindrischen Poren, welche die gleiche spezifische Oberfläche aufweisen wie die als Kugeln angenommenen Rußpartikel. Ihr Durchmesser ist nach

$$d_{\text{Pore}} = \frac{2}{3} \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon} d \quad (4.32)$$

Moduls [45, 146, 148]. *Haralampous und Koltzakis* untersuchen in [48] den Einfluss von Temperaturgradienten in der Rußschicht auf die Abbrandrate und kommen zu dem Ergebnis, dass diese nur bei sehr hoher Rußbelastung und hohen Abbrandraten von Bedeutung sind.

⁴nach *Brilhac et al.* [22] $2 < \tau_{\text{Kn}} < 10$

⁵*Neeft et al.* bestimmen in [108] die Abhängigkeit der Rußabbrandrate vom Abbrandfortschritt entsprechend einer Ordnung der Reaktion bezüglich der Rußmasse nach Gleichung (4.7) mit einem Wert $q \approx 2/3$ für diese Ordnung. Aus diesem Wert schließen sie auf einen Abbrand des Rußpartikels von der Oberfläche (*Shrinking-Core*-Abbrand). Diese Schlussfolgerung muss auf Basis hier der dargestellten Überlegungen verworfen werden.

aus der Porosität ε der Rußschicht und dem Durchmesser der Rußpartikel d zu berechnen. Für Werte $\varepsilon = 95\%$ und $d = 85$ nm ergibt sich beispielsweise die Porengröße zu etwa $1 \mu\text{m}$. In [22] werden die Verwindungen τ_{O_2} und τ_{Kn} in der Rußschicht experimentell zu Werten zwischen 1,8 und 2,5 bestimmt. Die Dicke der Rußschicht schließlich ergibt sich aus der flächenspezifischen Rußmasse m'' und der Porosität zu

$$l = \frac{m''}{(1 - \varepsilon) \rho_P} \quad (4.33)$$

Mit diesen Angaben kann das *Thiele*-Modul aus Gleichung (4.26) berechnet werden. Für eine als maximal anzusehende flächenspezifische Rußmasse von 30 g/m^2 , einen Sauerstoff-Partialdruck an der Oberfläche der Rußschicht von 50 mbar und eine Verwindung der Diffusionspfade von 2,5 sind in Abbildung 4.14 Werte für den Effektivitätsfaktor nach Gleichung (4.31) unter Verwendung von Gleichung (4.27) bis (4.33) in Abhängigkeit von Temperatur und Rußschichtdicke aufgetragen. Auf der oberen Achse sind die entsprechenden Werte für die Porosität angegeben. Es ist zu erkennen, dass Sauerstoff-Gradienten innerhalb der Rußschicht nur bei großer Rußschichtdicke und bei hoher Temperatur einen signifikanten Einfluss haben.

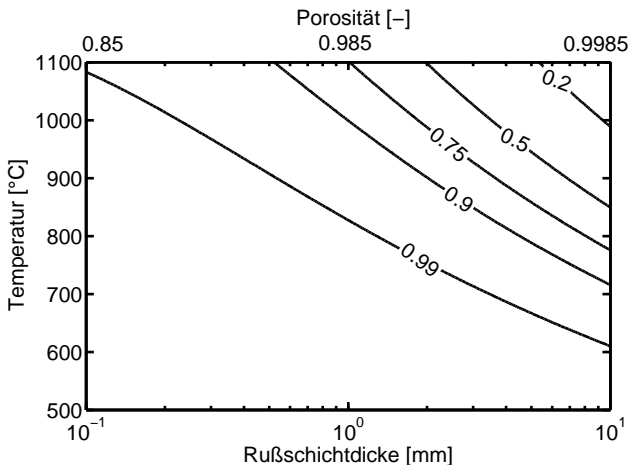


Abbildung 4.14: Effektivitätsfaktor η der Rußschicht bei $m'' = 30 \text{ g/m}^2$, 5% Sauerstoff-Molenbruch an der Oberfläche sowie veränderlicher Porosität der Rußschicht und Temperatur

Genauere Werte für die Porosität der Rußschicht liegen nicht vor. Sicher kann aufgrund der praktischen Erfahrung gesagt werden, dass für die gewählte flächenspezifische Beladung die Rußschicht nicht dicker als 0,5 mm ist. Nach Abbildung 4.14 gilt damit unterhalb von 1000 °C $\eta > 0,9$ und Porendiffusionshemmung der Reaktion kann als vernachlässigbar angesehen werden. Hinzu kommt, dass Sauerstoff zusätzlich durch Konvektion in die Rußschicht transportiert wird, und dass der Abbrand der Rußschicht schnell zu einer Zunahme der Porosität - und damit der Diffusionsgeschwindigkeit - führt. Daher kann der Effekt insgesamt als untergeordnet angesehen werden. Eine räumliche Auflösung der Rußschicht in dem Strömungsmodell des regenerierenden Filters ist nicht notwendig.

4.3.2 Vereinfachte Modellierung der äußeren Stofftransporthemmung

Die durch den Rußabbrand verursachte Abnahme der Sauerstoffkonzentration und ihre Rückwirkung auf die Reaktionsrate wurde schon in den ersten Regenerationsmodellen von *Bissett und Shadman* [18, 19] berücksichtigt, allerdings unter Vernachlässigung von Diffusion als Transportmechanismus. Diese Vereinfachung wird von anderen Autoren in nachfolgenden Veröffentlichungen übernommen (siehe z. B. [79]) und soll daher hier erörtert werden.

Das Verhältnis der Konvektions- zur Diffusionsgeschwindigkeit wird durch die *Péclet-Zahl* $Pe = vl/D$ ausgedrückt. Bei vereinfachender Annahme von molekularer Diffusion und für typische Werte für die Rußschichtdicke von $l = 0,5$ mm und für die Geschwindigkeit durch die Rußschicht $v = 5$ cm/s gilt $Pe < 1$ oberhalb einer Temperatur von 50 °C. Die Annahme vernachlässigbarer Diffusion ist somit nicht zulässig.

Aus Gründen der numerischen Einfachheit wird die Diffusion in den in der Literatur veröffentlichten Modellen trotzdem vernachlässigt. Bei den bislang betrachteten Wabenfiltern lassen sich so die Komponenten-Erhaltungsgleichungen als Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen formulieren, da sich für die Reaktionsrate ein algebraischer Ausdruck ergibt, wie im Folgenden gezeigt wird.

Die Abnahme der flächenspezifischen Rußmasse m'' ergibt sich bei Vernachlässigung der Diffusion aus der Sauerstoffbilanz und der Stöchiometrie der Rußoxidation aus Gleichung (4.3):

$$\dot{m}'' = \frac{M_C}{M_{O_2}} \frac{\dot{m}''_{Gas} (Y_{O_2, \text{ein}} - Y_{O_2, \text{aus}})}{(1 - \gamma/2)}. \quad (4.34)$$

Hierbei stehen M_C und M_{O_2} für die molaren Massen von Kohlenstoff und Sauerstoff, \dot{m}''_{Gas} für den flächenspezifischen Gasmassenstrom und $Y_{O_2, \text{ein}}$ und $Y_{O_2, \text{aus}}$

für die Sauerstoff-Massenanteile an den begrenzenden Flächen der Rußschicht. Der Verlauf des Sauerstoffanteils in der Rußschicht entspricht der Skizze in Abbildung 4.12(d). Der unbekannte Sauerstoffanteil an der Austrittsseite $Y_{O_2, \text{aus}}$ lässt sich aus der Sauerstoff-Transportgleichung bestimmen.

Ohne Berücksichtigung von Diffusion vereinfacht sich die Gleichung des stationären Sauerstoff-Transports in der Oberflächen-Normalenrichtung mit der Ortskoordinate z an jeder Stelle innerhalb der Rußschicht zu:

$$\frac{d(Y_{O_2} \dot{m}''_{\text{Gas}})}{dz} = \dot{m}'''_{O_2} = -\frac{M_{O_2}}{M_C} (1 - \gamma/2) r \frac{dm''}{dz} \quad (4.35)$$

$$= -\frac{M_{O_2}}{M_C} (1 - \gamma/2) k Y_{O_2}^n \rho_S, \quad (4.36)$$

mit hier vernachlässigter Änderung der Reaktionsrate mit dem Abbrandfortschritt, konstanter CO-Selektivität γ , sowie Abhängigkeit des Rußabbrands vom Massenanteil des Sauerstoffs n -ter Ordnung. Bei zusätzlicher Vernachlässigung der Massenstromänderung ergibt sich für den lokalen Gradienten des Sauerstoff-Massenanteils:

$$\frac{dY_{O_2}}{dz} = -\frac{M_{O_2}}{M_C} (1 - \gamma/2) \frac{k Y_{O_2}^n \rho_S}{\dot{m}''_{\text{Gas}}}. \quad (4.37)$$

Aus Abschnitt 4.3.1 ist bekannt, dass der Abbrand in der gesamten Rußschicht stattfindet. Wird entgegen dieser Erkenntnis wie in [18] bei fortschreitendem Abbrand eine Abnahme der Rußschichtdicke bei konstanter Schüttdichte ρ_S angenommen, so lässt sich das bestimmte Integral des Sauerstoffgradienten über die Rußschichtdicke $l = m''/\rho_S$ lösen, um den unbekanntenen Sauerstoffanteil an der Austrittsseite zu erhalten⁶.

$$Y_{O_2, \text{aus}} = \int_0^l \frac{dY_{O_2}}{dz} dz = {}^{1-n}\sqrt{Y_{O_2, \text{ein}}^{1-n} - \frac{M_{O_2}}{M_C} (1 - n) (1 - \gamma/2) \frac{km''}{\dot{m}''_{\text{Gas}}}}. \quad (4.38)$$

Durch Einsetzen in Gleichung (4.34) lässt sich die unter den getroffenen Annahmen gültige Abbrandrate bestimmen.

Auf diese Weise ergibt sich für die Abbrandrate ein algebraischer Ausdruck, mit dem der Selbsthemmung der Reaktion bei hohen Reaktionsraten durch Stofftransportlimitierung Rechnung getragen wird. Er stellt jedoch nur eine Annäherung an die Realität dar, da er auf falschen Annahmen beruht. Die Reaktionsrate

⁶In [18] und folgenden Veröffentlichungen wird von einer Abhängigkeit der Reaktionsrate vom Sauerstoffanteil erster Ordnung ausgegangen. In diesem Fall ergibt sich für den Sauerstoffanteil am Austritt der Rußschicht $Y_{O_2, \text{aus}} = Y_{O_2, \text{ein}} \exp\left(-\frac{M_{O_2}}{M_C} (1 - \gamma/2) \frac{km''}{\dot{m}''_{\text{Gas}}}\right)$

hängt nur vom Temperaturfeld im Filter, nicht vom Feld der Sauerstoffkonzentration ab. Damit sind Effekte wie die Abnahme der Sauerstoffkonzentration in der Anströmung oder Rückdiffusion von Sauerstoff aus dem abströmseitigen Teil der Filtertasche zur Rußschicht nicht vorhersagbar.

In Abschnitt (5.2.1) werden Ergebnisse dieses vereinfachten Modells und des höherwertigen Modells mit Lösung der Komponenten-Erhaltungsgleichung für Sauerstoff verglichen.

4.4 Diskussion

Aus Abbrandversuchen mit Ruß aus einem Rußgenerator unter konstanten Bedingungen wurde ein Kinetikmodell des Rußabbrands zur Beschreibung der Abhängigkeit der Reaktionsrate von der Temperatur, vom Sauerstoff-Partialdruck und vom Abbrandfortschritt abgeleitet. Die ermittelte Aktivierungsenergie liegt mit 162 kJ/mol im Bereich in der Literatur veröffentlichter Werte von 100-180 kJ/mol. Die Abhängigkeit vom Sauerstoff-Partialdruck mit einer Ordnung von 0,91 stimmt mit den in der Literatur häufig veröffentlichten Werten von 0,8-1 überein.

Die Abhängigkeit der Reaktionsrate vom Abbrandfortschritt konnte durch die isotherme Reaktionsführung unbeeinflusst von Änderungen in den Versuchsbedingungen untersucht werden. Es zeigt sich ein von den Versuchsbedingungen unabhängiges Verhalten mit Zunahme der Reaktionsrate zu Beginn bis zu einem Maximum im Bereich von ca. 75% verbleibender Rußmasse und anschließender Abnahme der Reaktionsrate. Da der Einfluss von Stofftransporteffekten aufgrund theoretischer Überlegungen ausgeschlossen werden kann, muss die Änderung der Reaktionsrate auf Änderungen der chemischen Aktivität des Kohlenstoffs zurückzuführen sein.

Aus den theoretischen Überlegungen zum Stofftransporteinfluss auf die Abbrandrate kann auch geschlossen werden, dass der Einfluss von Gradienten der Sauerstoffkonzentration innerhalb der Rußschicht im Betriebsbereich des Partikelfilters vernachlässigbar ist. Daher ist die Auflösung der Rußschicht durch das Strömungsmodell nicht notwendig. Die Lösung der Komponenten-Erhaltungsgleichung für Sauerstoff ist jedoch zur Abbildung der äußeren Stofftransporthemmung bei hohen Abbrandraten sinnvoll.

Die größte Unsicherheit des kinetischen Modells liegt in der Selektivität der Reaktion bezüglich Kohlenmonoxid, welche in den Versuchen einer signifikanten Streuung unterlag (siehe Abbildung 4.10).

5 Numerische Berechnung des Abbrands der Rußschicht

Das vollständige Abbrandmodell der Rußschicht ergibt sich aus der Kombination des in Kapitel 4 erarbeiteten kinetischen Modells mit der Komponenten-Erhaltungsgleichung für Sauerstoff, welche mit Hilfe der Strömungssimulationssoftware *Fluent* gelöst wurde. Das Strömungsmodell des Sintermetall-Partikelfilters aus Kapitel 2, ergänzt um das Abbrandmodell, erlaubte schließlich die Simulation der DPF-Regeneration. Wegen des hohen numerischen Aufwands von Rechnungen mit dem Modell des Sintermetall-DPF wurden zuvor prinzipielle Untersuchungen zum Abbrand im Versuchsreaktor aus Kapitel 4 durchgeführt.

5.1 Modellierung

5.1.1 Formulierung der Quellterme des Rußabbrandmodells

Im Strömungsmodell des DPF in der Strömungssimulationssoftware wurde die flächenspezifische Rußmasse $m''(t)$ am Ende jedes Zeitschritts entsprechend der lokalen Reaktionsrate nach den Gleichungen (4.23) bzw. (4.24) vermindert, so dass:

$$m''(t + \Delta t) = m''(t) \left(1 - r(t) \left(1 - z_1 e^{-z_2 X(t)} \right) \right). \quad (5.1)$$

Der Verbrauch des Sauerstoffs durch die Oxidation wurde durch einen volumenspezifischen Senkenterm in der Zellschicht berücksichtigt, in welcher die flächenspezifische Rußbelastung m'' als *UDM* gespeichert ist. Der Senkenterm hängt nach

$$\dot{m}_{O_2}''' = - \frac{(m''(t - \Delta t) - m''(t))}{dz_{\text{zelle}} \Delta t} \frac{M_{O_2}}{M_C} (1 - \gamma/2) \quad (5.2)$$

von der Rußmassenabnahme während des letzten Zeitschritts, der Selektivität γ der Reaktion bezüglich CO nach Gleichung (4.22) und dem Durchmesser der Zelle in der oberflächennormalen Richtung dz_{zelle} ab.

Wegen des Übergangs des festen Kohlenstoffs in die Gasphase wurde in der Kontinuitätsgleichung ein Quellterm eingeführt:

$$\dot{m}''' = \frac{(m''(t - \Delta t) - m''(t))}{dz_{\text{zelle}} \Delta t}. \quad (5.3)$$

Die CO- und CO₂-Konzentrationen und ihre Änderung wurden nicht berücksichtigt, da von ihnen keine unmittelbare Wirkung auf die Reaktion ausgeht. Die Auswirkung auf die Stoffwerte des Gases wurde vernachlässigt.

Bei der Rußoxidation wird die Reaktionsenthalpie nach Gleichung (4.4) freigesetzt. Im Strömungsmodell wurde dies durch einen volumenbezogenen Quellterm in Abhängigkeit der Selektivität der Reaktion bezüglich CO nach Gleichung (4.22) in der Energie-Erhaltungsgleichung berücksichtigt:

$$\dot{Q}''' = \frac{(m''(t - \Delta t) - m''(t))}{dz_{\text{zelle}} \Delta t} (\gamma \Delta H_{\text{C,CO}} + (1 - \gamma) \Delta H_{\text{C,CO}_2}). \quad (5.4)$$

5.1.2 Strömungswiderstand der Rußschicht beim Abbrand

Mit der Temperaturerhöhung des Abgases bei der Einleitung der DPF-Regeneration geht die Erhöhung der Permeabilität der Rußschicht einher, was auf die Zunahme der mittleren freien Weglänge des Gases zurückzuführen ist. Nach dem Einsetzen des Abbrands beschleunigt sich diese Zunahme durch Änderungen der Struktur der Rußschicht. Für die Simulation der DPF-Regeneration ist die Änderung des lokalen Strömungswiderstands wichtig, da sich hierdurch die Strömungsverteilung im Verlauf des Abbrands ändern kann. Hiermit geht wiederum eine Änderung der lokalen Reaktionsbedingungen einher.

Strömungswiderstand der Rußschicht bei Änderung der Gastemperatur

Die mit dem halben Durchmesser und der mittleren freien Weglänge λ der Gasmoleküle gebildete *Knudsen-Zahl* $\text{Kn} = 2\lambda/d$ dient zur Charakterisierung des Strömungszustands bei der Umströmung eines Partikels. Bei kleinen Werten von Kn kann das strömende Trägergas in Bezug auf seine Interaktion mit den Partikeln als Kontinuum angenommen werden. Bei großer *Knudsen-Zahl* bildet sich keine Grenzschicht an der Partikeloberfläche aus. Nur solche Gasmoleküle interagieren mit dem Partikel, die direkt mit ihm kollidieren, und der Impulsaustausch zwischen Gas und Partikel ist reduziert. Für die im Betriebsbereich des Partikelfilters

maßgeblichen Temperaturen liegt die *Knudsen*-Zahl für Rußagglomerate im Bereich von 0,5 bis 10, deckt somit den Übergangsbereich von Kontinuumsströmung zu molekularer Strömung ab [116].

Die Widerstandskraft der abgeschiedenen Rußpartikel, damit auch der Strömungswiderstand der Rußschicht (siehe Gleichung (3.19)), sinkt zu höherer Fluidtemperatur wegen des zunehmenden Schlupfes entsprechend der Zunahme der mittleren freien Weglänge der Gasmoleküle. Eine entsprechende Korrektur der Permeabilität bei der Berechnung des Quellterms in der Impulserhaltungsgleichung (siehe Gleichung (3.20)) erfolgt nach

$$(\rho_S K)_{\text{Ru}\beta} = \text{Cu} (\rho_S K)_{\text{Ru}\beta,0} \quad (5.5)$$

durch einen Schlupf-Korrekturfaktor Cu , der auch als *Cunningham*-Korrekturfaktor bezeichnet wird, mit [42]

$$\text{Cu} = 1 + A \text{Kn}. \quad (5.6)$$

Für den dimensionslosen Koeffizienten A gilt

$$A = \alpha + \beta \exp(-\gamma/\text{Kn}) \quad (5.7)$$

mit $\alpha = 1,142$, $\beta = 0,558$, $\gamma = 0,999$ [4]. Zur Bestimmung der mittleren freien Weglänge des Gases liegt eine Bestimmungsgleichung aus der kinetischen Gastheorie vor [17]:

$$\lambda = \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi p \sigma^2} \quad (5.8)$$

mit der *Boltzmann*-Konstanten k_B und dem mittleren Kollisionsdurchmesser der Gasmoleküle σ ($3,798 \cdot 10^{-10} \text{m}$ für Stickstoff [154]).

Entscheidend zur Berechnung des Schlupfkorrekturfaktors ist die Verwendung eines Größenmaßes der Partikel bei der Bestimmung der *Knudsen*-Zahl, welches für den Druckverlust der Rußschicht charakteristisch ist. Die experimentelle Untersuchung des Strömungswiderstands von Rußschichten unterschiedlicher Partikelgrößen und der Veränderung des Strömungswiderstands einer Rußschicht bei steigender Temperatur, welche in Anhang E dargestellt sind, ergaben, dass diese charakteristische Abmessung der massengemittelte Mobilitätsdurchmesser ist. Dieser lässt sich aus einer gemessenen Partikelgrößenverteilung bei Annahme des in Abschnitt 3.1.1 dargestellten Zusammenhangs zwischen Mobilitätsdurchmesser und Agglomeratdichte nach Gleichung (3.5) berechnen (siehe Gleichung (C.1)).

Abnahme des Strömungswiderstands durch Abbrand der Rußschicht

Während des Rußabbrands verringert sich der Strömungswiderstand der Rußschicht, wobei die genaue Abhängigkeit wegen der gleichzeitigen Änderung von Partikelgröße und -Porosität sowie von Rußschichtdicke und -Porosität a priori nicht vorherzusagen ist. Durch Messung des Differenzdrucks über den Versuchsreaktor aus Abschnitt 4.2 wurde die Abnahme des Strömungswiderstands der Rußschicht experimentell bestimmt. In Abbildung 5.1 ist der Differenzdruck, normiert mit dem Differenzdruck zu Beginn des Versuchs $\Delta p_1 = \Delta p(m = m_0)$ und dem Differenzdruck bei vollständig abgebrannter Rußschicht $\Delta p_0 = \Delta p(m = 0)$, über der mit der Anfangsbeladung m_0 normierten Rußmasse aufgetragen. Dargestellt ist der Mittelwert über 12 Versuche mit unterschiedlicher, konstanter Versuchstemperatur und ansonsten gleichen Versuchsbedingungen (Sauerstoff-Molenbruch im Eduktgas $\chi_{\text{O}_2,0} = 10\%$, Anfangsbeladung $m_0'' = 21,9 \text{ g/m}^2 \pm 0,5 \text{ g/m}^2$, Massenströmdichte $\dot{m}_{\text{Gas}}'' = 20 \text{ g/m}^2\text{s}$) sowie die jeweiligen Minimal- und Maximalwerte. Als Bezug ist die Gerade eingetragen, welche der Proportionalität von Strömungswiderstand und Rußmasse entspricht. Der tatsächliche Verlauf weicht geringfügig von der Proportionalität ab und weist mehrere Wendepunkte auf. Unterhalb von 20% verbleibender Rußmasse wurde durch die Rußschicht kein nennenswerter Druckverlust verursacht. Der Verlauf wies keine signifikante Abhängigkeit von der Temperatur auf.

Deutliche Unterschiede ergaben sich bei Variation der spezifischen Rußmasse zu Beginn des Abbrands, wie in Abbildung 5.2 zu erkennen ist. Dargestellt ist wiederum der normierte Differenzdruck über den Versuchsreaktor über der verbleibenden Rußmasse aus vier Versuchen mit unterschiedlicher Anfangsbeladung, wobei die übrigen Versuchsbedingungen im Wesentlichen konstant waren ($\chi_{\text{O}_2,0} = 10\%$, $\dot{m}_{\text{Gas}}'' = 20 \text{ g/m}^2\text{s}$, $T_0 = 630 \text{ °C} \pm 25 \text{ °C}$). Es ist zu erkennen, dass bei höherer Rußbeladung der Abfall des Strömungswiderstands bei 40% verbleibender Rußmasse deutlich steiler ausfällt. Ebenso nimmt der Anteil des Rußes, bei dem der Strömungswiderstand verschwindet, mit steigender Anfangsbeladung zu. Die Rußschicht in dem Experiment höchster Anfangsbeladung wurde schon bei einer verbleibenden Rußmasse vollständig durchlässig, die in etwa der niedrigsten Anfangsbeladung entsprach.

Eine mögliche Erklärung des Abfalls des Differenzdrucks um 20% verbleibender Rußmasse und seiner Abhängigkeit von der Anfangsbeladung ist das Auftreten von lokalen Schwachstellen in der Rußschicht. Diese wurden in teilregenerierten Rußschichten oberhalb von überdurchschnittlich großen Poren beobachtet, wie in Abbildung 5.3 dargestellt. Vermutlich kollabiert die Rußschicht nachdem ih-

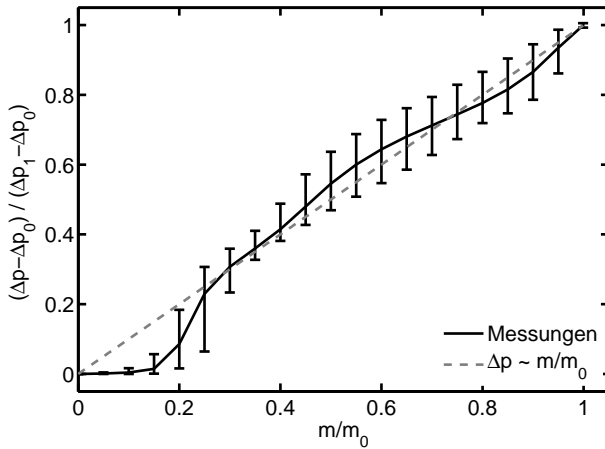


Abbildung 5.1: Normierter Differenzdruck über die Rußschicht über dem Anteil des verbleibenden Rußes bei Versuchstemperaturen zwischen 580 °C und 715 °C

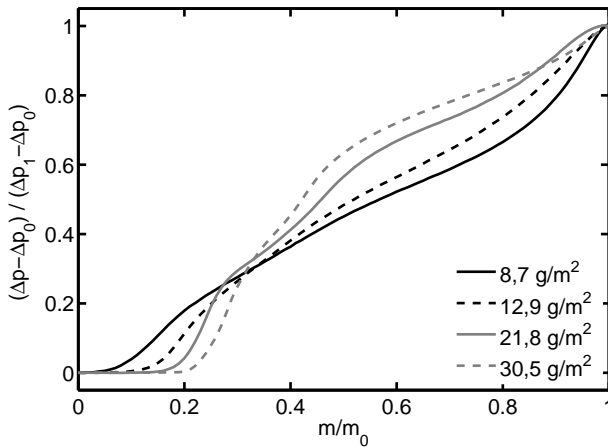


Abbildung 5.2: Normierter Differenzdruck über die Rußschicht über dem Anteil des verbleibenden Rußes bei Variation der Anfangsrußbelastung

re mechanische Stabilität durch den Abbrand verringert worden ist. Ein großes Druckgefälle über die Rußschicht, wie es mit einer größeren Rußbelastung einhergeht, verstärkt die mechanische Belastung der Rußschicht und führt so zu einem früheren Auftreten dieser Schwachstellen.

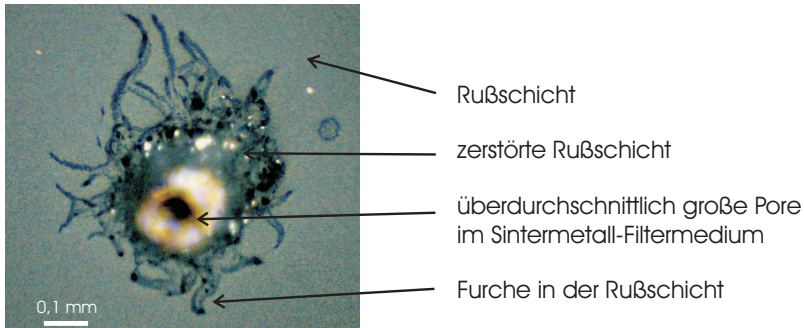


Abbildung 5.3: Nahaufnahme der teilregenerierten Rußschicht mit lokaler Störstelle oberhalb einer überdurchschnittlich großen Pore

Für die Rückwirkung des Strömungswiderstands auf den Abbrand ist die Annahme von Proportionalität des Strömungswiderstands zur Rußmasse bzw. zum Abbrandfortschritt zum jetzigen Stand des Regenerationsmodells eine hinreichend genaue Annäherung. Ein größerer Fehler ist hierbei nur unterhalb von 10% verbleibender Rußmasse zu erwarten.

5.2 Simulation

Wegen des hohen numerischen Aufwands von instationären Rechnungen mit dem Strömungsmodell des Sintermetall-DPF wurde das Rußabbrandmodell zunächst auf ein Modell des Versuchsreaktors angewandt. Zunächst wurde das vollständige Modell anhand von Experimenten im Versuchsreaktor mit hoher Abbrandrate und niedrigem Gasmassenstrom verifiziert, bei denen der Effekt der äußeren Stofftransporthemmung messbar war. Außerdem wurden Simulationen des Rußabbrands unter Bedingungen durchgeführt, welche in dem Versuchsaufbau nicht darstellbar waren und bei denen sich unkontrollierte Reaktionsverläufe ergeben.

Schließlich wurde die Regeneration des Sintermetall-DPF unter Berücksichtigung der lokalen Veränderungen von Temperatur und der spezifischen Rußmasse berechnet.

5.2.1 Berechnung des Rußabbrands im Versuchsreaktor

Rechengebiet und Randbedingungen

Als Modellgeometrie zur Simulation des Rußabbrands im Versuchsreaktor (siehe Abschnitt 4.2.1) wurde die Probe des Filtermediums (34 mm x 34 mm x 0,5 mm) und ein Anström- und Abströmbereich von 34 mm bzw. 17 mm Länge betrachtet. Das numerische Gitter umfasste etwa 70.000 Zellen. Wie in den Versuchen wurde der Rußabbrand durch plötzliche Erhöhung des Sauerstoffanteils des Gases zum Zeitpunkt $t = 0$ eingeleitet.

Als Randbedingung für die Simulation wurden am Eintritt der Massenstrom und die Temperatur und am Austritt der Druck vorgegeben. Die am Eintritt vorgegebene Temperatur wurde an der Wand des Reaktors als Randbedingung und im gesamten Rechengebiet als Anfangsbedingung vorgegeben.

Die temperaturabhängige spezifische Wärmekapazität des Sintermetall-Filtermediums ist aus Messungen bekannt und ändert sich zwischen 20 °C und 1000 °C von 472 J/kgK auf 641 J/kgK. Für die Wärmeleitfähigkeit des Filtermediums wurden temperaturabhängige Werte aus [131] verwendet. Sie ändert sich zwischen 20 °C und 1000 °C von 5,5 W/mK auf 11,6 W/mK.

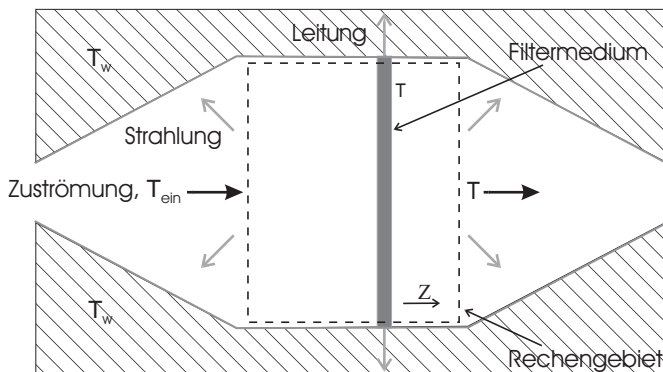


Abbildung 5.4: Skizze der Wärmebilanz des Filtermediums im Versuchsreaktor

In Abbildung 5.4 ist die makroskopische Wärmebilanz des Rechengebiets skizziert. Zur korrekten Wiedergabe der Temperaturen während des Versuchs muss der Strahlungsaustausch zwischen dem durch die Exothermie der Reaktion aufgeheizten Filtermedium und dem Reaktorgehäuse berücksichtigt werden. Der geschätzte

Anteil der Strahlung am Wärmeverlust der Probe betrug bei den Versuchsbedingungen zwischen 70% und 90%.

Der Strahlungswärmestrom auf der Filterprobe der Temperatur T an die Reaktorwand der Temperatur T_W beträgt nach [156]

$$\dot{Q}'' = C (T^4 - T_W^4) \quad (5.9)$$

mit der Strahlungsaustauschzahl C . Für diese wurde vereinfachend der Wert zwischen zwei unendlich ausgedehnten Platten verwendet:

$$C = \frac{\sigma}{\frac{1}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon_W} - 1} \quad (5.10)$$

mit der *Stefan-Boltzmann*-Konstanten σ .

Aus Gründen der numerischen Stabilität wurde der Strahlungsaustauschterm in der Temperatur linearisiert:

$$T^4 - T_W^4 = (T - T_W) T_W^3 \left(\left(\frac{T}{T_W} \right)^3 + \left(\frac{T}{T_W} \right)^2 + \frac{T}{T_W} + 1 \right), \quad (5.11)$$

$$\approx 4 (T - T_W) T_W^3. \quad (5.12)$$

Der Linearisierungsfehler hängt vom Verhältnis T/T_W ab und beträgt bis zu einem Temperaturunterschied von 3,5% der Bezugstemperatur T_W weniger als 5%.

Im Strömungsmodell wurde in den der Oberfläche benachbarten Zellschichten des Filtermediums ein volumenbezogener, temperaturabhängiger Quellterm

$$\dot{Q}'''(t) = \frac{4C (T - T_W) T_W^3}{dz_{\text{Zelle}} \Delta t} \quad (5.13)$$

in der Energie-Erhaltungsgleichung berücksichtigt. Für den Emissionskoeffizienten ε in Gleichung (5.10) wurde auf der stromauf gelegenen, mit Ruß beaufschlagten Seite des Filtermediums der Wert 0,95 (Kohlenstofffasern [156]), auf der stromab gelegenen Seite und für den Emissionskoeffizienten der Wand ε_W der Wert 0,79 (oxidiertes Stahl [156]) angenommen.

Durch die Strömungssimulationssoftware wurden die Erhaltungsgleichungen in Raum und Zeit in zweiter Ordnung diskretisiert und gelöst. Die konstante Zeitschrittweite wurde so gewählt, dass eine weitere Reduktion keine Veränderung im Temperaturverlauf in der Mitte des Filtermediums bewirkte. Bei den im Folgenden dargestellten Ergebnissen betrug sie zwischen 0,1 s und 0,5 s, wobei bei höheren Versuchstemperaturen eine kleinere Zeitschrittweite notwendig war.

Abgleich mit experimentellen Ergebnissen

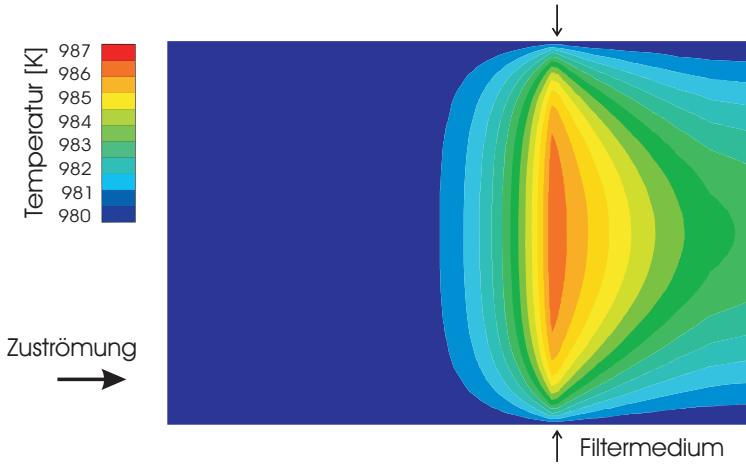
Bei den Abbrandversuchen zur Bestimmung der Parameter des kinetischen Modells in Abschnitt 4.2 wurde durch die Wahl der Versuchsbedingungen sicher gestellt, dass die Reaktionsrate kinetisch limitiert war und Stofftransporteffekte vernachlässigt werden konnten. In weiteren Versuchen konnten jedoch durch hohe Versuchstemperatur und niedrige Raumgeschwindigkeit auch solche Reaktionsbedingungen eingestellt werden, bei denen Stofftransporteffekte durch deutlichen Abfall der Sauerstoffkonzentration am Reaktorauslass festgestellt werden konnten. Die gemessenen Reaktionsraten in diesen Versuchen sind geeignet, um das vollständige Abbrandmodell unter Berücksichtigung der lokalen und zeitlichen Änderung der Sauerstoffkonzentration zu validieren.

Die Abbildungen 5.5(a) und 5.5(b) zeigen exemplarisch die Verteilung von Temperatur bzw. Sauerstoff-Molenbruch für einen Zeitpunkt 25 s nach Beginn des Abbrands bei einer Anfangsbeladung $m_0'' = 21,6 \text{ g/m}^2$, einer Massenstromdichte $\dot{m}_{\text{Gas}}'' = 20 \text{ g/m}^2\text{s}$, einer Anfangstemperatur $T_0 = 707 \text{ }^\circ\text{C}$ (980 K) und $\chi_{\text{O}_2,0} = 10\%$ Sauerstoff-Molenbruch am Eintritt.

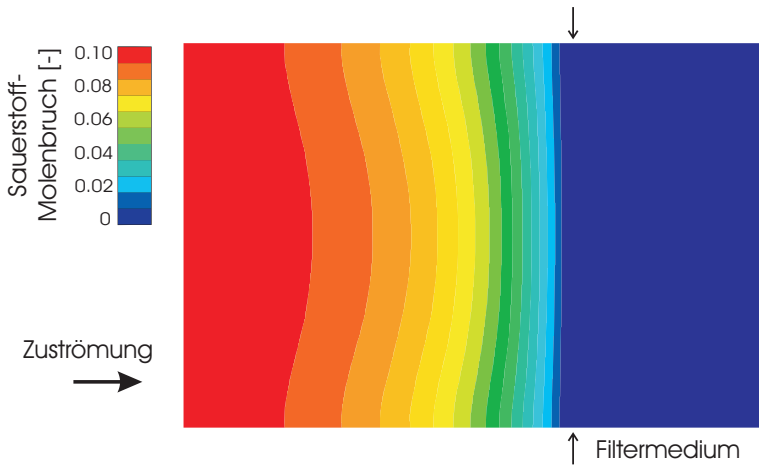
Der Sauerstoffgehalt des Gases wird durch den Rußabbrand vollständig aufgebraucht. Da in die Quellterme des kinetischen Modells in der Rußschicht die lokale Sauerstoffkonzentration eingeht, wird die Absenkung der Reaktionsgeschwindigkeit durch die äußere Stofftransporthemmung erfasst. Die Exothermie des Rußabbrands führt wegen des guten Wärmeübergangs an die Reaktorwand durch Wärmestrahlung lediglich zu einer Erhöhung der Temperatur des Filtermediums in der Mitte der Probe um 7 K.

Aus den Ergebnissen der Simulation für die Rußmassenabnahme bei unterschiedlicher Temperatur und Strömungsgeschwindigkeit wurde - wie bei der Analyse der gemessenen Abbrandraten - die spezifische Reaktionsrate r nach Gleichung (4.19) und der Reaktionskoeffizient k nach Gleichung (4.20) bestimmt. Die so bestimmten Reaktionskoeffizienten aus der Simulation sowie jene aus den Versuchen mit Einfluss der Stofftransportlimitierung sind in Abbildung 5.6 über der reziproken Eintrittstemperatur aufgetragen. Zum Vergleich ist die *Arrhenius*-Gerade des Kinetikmodells mit $k_0 = 7,7 \cdot 10^7 \text{ 1/s}$ und $E_A = 162 \cdot 10^6 \text{ J/kmol}$ dargestellt.

Bei hoher Temperatur ist die durch die Stofftransportlimitierung verursachte Abweichung des Reaktionskoeffizienten von der *Arrhenius*-Geraden zu erkennen. Bei geringerem Gasmassenstrom setzt dieser Effekt bereits bei niedrigerer Temperatur ein. In den Ergebnissen der Simulation wird diese Abhängigkeit der Reaktionsrate von der Temperatur und vom Gasmassenstrom gut wiedergegeben.



(a) Temperatur



(b) Sauerstoff-Molenbruch

Abbildung 5.5: Simulationsergebnisse für den Rußabbrand in der Versuchsgeometrie 25 s nach Beginn des Abbrands bei $m_0'' = 21,6 \text{ g/m}^2$, $\dot{m}_{\text{Gas}}'' = 20 \text{ g/m}^2\text{s}$, $T_0 = 707^\circ\text{C}$ (980 K) und $\chi_{\text{O}_2,0} = 10\%$ Sauerstoff-Molenbruch am Eintritt

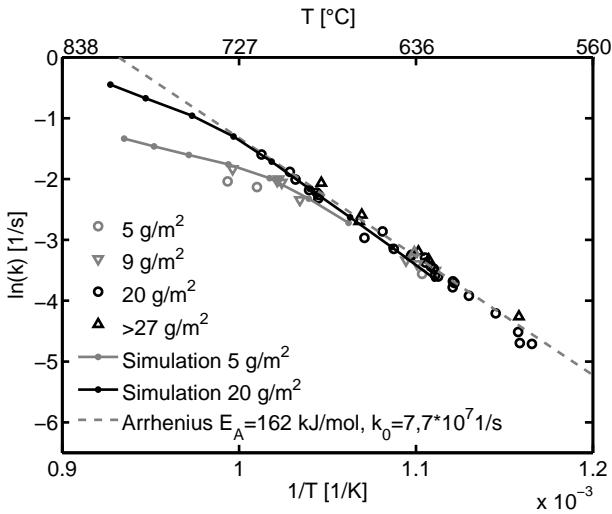


Abbildung 5.6: *Arrhenius*-Diagramm der Reaktionskoeffizienten aus Experiment und Simulation für unterschiedlichen Gasmassenstrom

Simulation einer thermisch unkontrollierten Reaktion

Durch die Exothermie des Rußabbrands erhöht sich die Temperatur des Filtermediums, bis der erzeugte Wärmestrom durch Konvektion, Leitung und Strahlung vollständig an die Umgebung abgegeben wird. Wegen des guten Wärmeübergangs an den Reaktorkörper durch Strahlung ist hierzu im Versuchsreaktor bereits ein geringer Temperaturanstieg ausreichend, so dass sich der gewünschte, nahezu isotherme Ablauf der Reaktion ergibt. Die Zunahme der Reaktionsrate durch den Temperaturanstieg ist vernachlässigbar.

Im Sintermetall-DPF ist der spezifische Wärmeübergang vom Filtermedium an die Umgebung deutlich geringer, da der größte Teil der Rußschicht nicht der Umgebung, sondern der gegenüberliegenden Taschenoberfläche mit gleichfalls erhöhter Temperatur exponiert ist. Ähnliche Bedingungen ergeben sich im Strömungsmodell des Versuchsreaktors bei Unterdrückung des durch Gleichung (5.13) modellierten Strahlungsterms.

Abbildung 5.7 zeigt exemplarisch Ergebnisse für $\dot{m}''_{\text{Gas}} = 20 \text{ g/m}^2\text{s}$, $m''_0 = 20 \text{ g/m}^2$, $T_0 = 667 \text{ °C}$ (940 K) und $\chi_{\text{O}_2,0} = 10\%$ ohne Strahlungsaustausch zwischen Filtermedium und Reaktor. Dargestellt ist die Temperatur und der Sauer-

stoff-Molenbruch an einem Punkt in der Mitte des Rechengebiets innerhalb sowie an Punkten 2 mm stromauf bzw. stromab des Filtermediums.

Zu Beginn der Reaktion nimmt die Temperatur langsam entsprechend der Änderung der Abbrandrate mit dem Abbrandfortschritt zu. Nach etwa 15 s kommt es zum Durchgehen der Reaktion und die Temperatur im Filtermedium steigt innerhalb einer Hundertstelsekunde um etwa 700 K. Der Sauerstoffanteil im Filtermedium sinkt entsprechend der hohen Abbrandrate auf Null. Der Bereich um den Zeitpunkt des Durchgehens der Reaktion ist in Abbildung 5.8 vergrößert dargestellt.

Im vorliegenden Reaktionssystem ist der Einfluss der Reaktionsenthalpie auf die Reaktionsrate nicht vernachlässigbar. Zum Zeitpunkt des Durchgehens der Reaktion verursacht die Exothermie eine so starke Zunahme der Reaktionsrate, dass die zusätzliche Reaktionsenthalpie größer ist als der zusätzlich durch Leitung und Konvektion abgegebene Wärmestrom. Die Reaktion beschleunigt sich selbst, bis die Reaktionsrate durch den Stofftransport zum Filtermedium begrenzt wird.

Die Reaktionsrate und die Temperatur steigen dabei kurzzeitig sogar über die Rate, die dem vollständigen Umsatz des konvektiv zugeführten Sauerstoffs entspricht. Zusätzlich diffundiert der Sauerstoff im Reaktorgehäuse stromab des Filtermediums zur Rußschicht und reagiert dort, wie in den in Abbildung 5.9 dargestellten Profilen des Sauerstoffmolenbruchs entlang der zentralen Achse in Hauptströmungsrichtung z zu erkennen ist. Der oberste Verlauf entspricht einem Zeitpunkt $t = 15$ s vor dem Umschlag, die weiteren Verläufe den Zeitpunkten, die in der linken Darstellung in Abbildung 5.8 markiert sind.

Nachdem der Sauerstoff im abströmseitigen Reaktorvolumen aufgebraucht ist, fällt die Temperatur zurück in einen Gleichgewichtszustand, in welchem die Reaktion durch die konvektiv zugeführte Sauerstoffmenge limitiert ist. Die Reaktion verweilt in diesem Zustand, bis der Ruß in der Mitte der Filterprobe vollständig umgesetzt ist. Wegen der niedrigeren Temperatur in der Nähe der Reaktorwand, welche sich aus der Temperaturrandbedingung ergibt, geht die Reaktion in diesem Bereich nicht durch.

Die Simulation dieses Vorgangs war numerisch sehr aufwändig. Die zu Beginn der Reaktion hinreichend kleine Zeitschrittweite von $5 \cdot 10^{-2}$ s musste während des Umschlags wegen der starken zeitlichen Änderung auf $1 \cdot 10^{-3}$ s, während der Sauerstoff-limitierten Reaktion auf $2,5 \cdot 10^{-3}$ s reduziert werden. Bei größeren Zeitschritten verhielt sich der Quellterm in der Energiegleichung numerisch instabil, der sich aus dem Produkt des großen und stark temperaturabhängigen *Arrhenius*-Terms und des gegen Null gehenden Terms zur Berücksichtigung der Sauerstoffab-

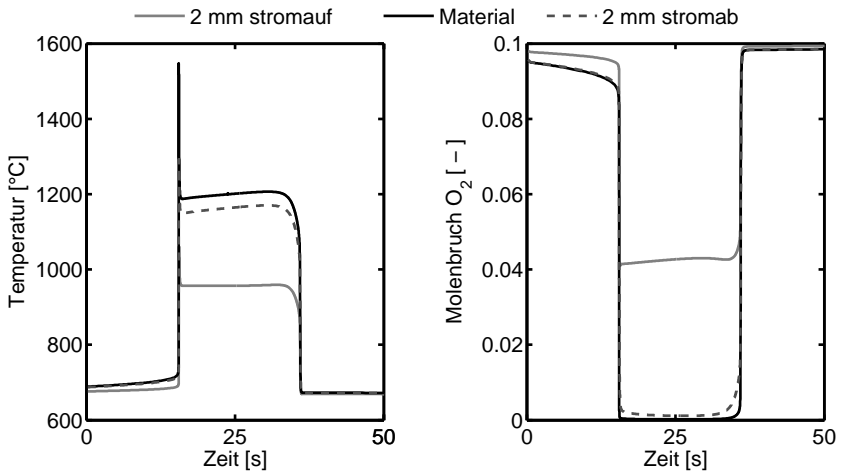


Abbildung 5.7: Simulationsergebnisse für eine thermisch unkontrollierte Reaktion der Rußschicht

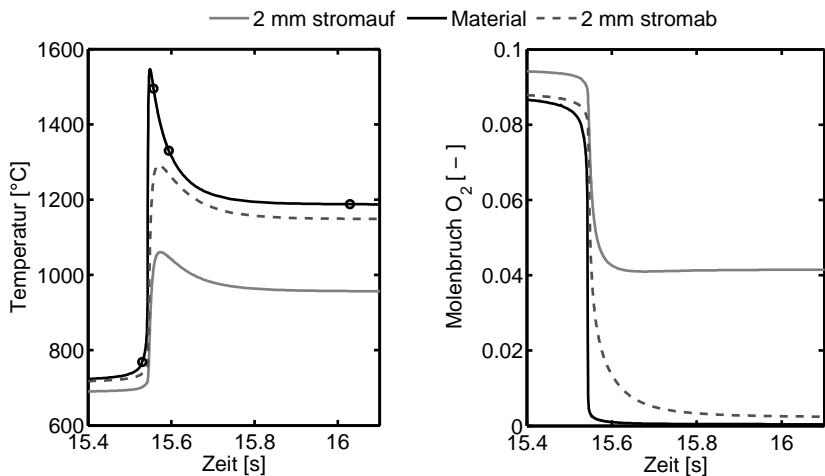


Abbildung 5.8: Vergrößerte Darstellung der Verläufe in Abbildung 5.7 um den Zeitpunkt des Durchgehens der Reaktion

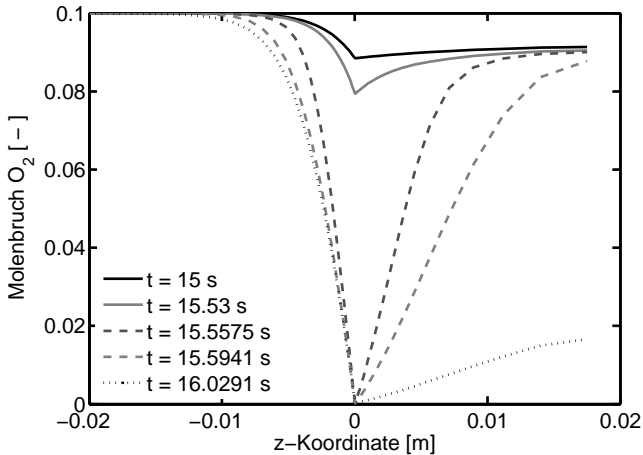


Abbildung 5.9: Simulationsergebnisse für den Sauerstoffmolenbruch entlang der Hauptachse des Versuchsreaktors während des Durchgehens der thermisch unkontrollierten Reaktion

hängigkeit ergibt. Die benötigte Rechenzeit betrug auf einem Intel Xeon 3 GHz-Prozessor etwa 10 Tage.

Der dargestellte Versuch ist dazu geeignet, das in Abschnitt 4.3.2 vorgestellte vereinfachte Modell der Stofftransportlimitierung unter Vernachlässigung der Diffusion mit dem höherwertigen Modell mit Lösung der Komponenten-Erhaltungsgleichung des Sauerstoffs zu vergleichen. Dazu wurde im Strömungsmodell bei der Veränderung der lokalen Rußmasse nach Gleichung (5.1) die spezifische Reaktionsrate nach den Gleichungen (4.34) und (4.38) verwendet. Bei der vereinfachten Modellierung entfällt die Lösung der Komponenten-Erhaltungsgleichungen, da der Sauerstoff-Molenbruch am Eintritt in die Rußschicht nicht vom Rußabbrand beeinflusst und im Rechenggebiet konstant ist.

Abbildung 5.10 zeigt den Verlauf der Temperatur in der Mitte der Probe des Filtermediums für beide Modellierungsansätze. Wie zu erkennen ist, zeigt sich auch bei vereinfachter Modellierung der Sauerstoffverknappung ein Umschlag zu Stofftransport-limitierter Reaktionsrate. Dieser findet etwas früher statt und weist nicht die Temperaturspitze auf, welche durch die diffusiv zur Rußschicht transportierte Sauerstoffmenge im abströmseitigen Reaktorgehäuse verursacht wird. Der im rechten Teil von Abbildung 5.10 dargestellte Verlauf der mittleren flächenspe-

zifischen Rußmasse stimmt besser überein, da sich die Abbrandraten am Rand der Probe nur wenig unterscheiden.

Während des Stofftransport-limitierten Abbrands liegt die Temperatur in der Mitte der Filterprobe um etwa 100 K niedriger, als bei Verwendung des detaillierteren Modells. Dies ist dadurch zu erklären, dass am Rand der Filterprobe die Abbrandgeschwindigkeit wegen der geringeren Temperatur deutlich niedriger ist, und so ein Teil des Sauerstoffs nicht reagiert und auf die Abströmseite der Probe transportiert wird. Der zusätzliche Sauerstofftransport durch Rückdiffusion zu den Bereichen sehr hoher Temperatur, gut zu erkennen aus dem in Abbildung 5.11 dargestellten Feld des Sauerstoff-Molenbruchs aus den Ergebnissen des vollständigen Modells zum Zeitpunkt $t = 16$ s, fehlt in dem Modell mit vernachlässigter Diffusion.

Vorteil der vereinfachten Modellierung ist der erheblich geringere Rechenaufwand. Die Rechnung ist für die Zeitschrittweite $5 \cdot 10^{-2}$ s während der gesamten Simulationszeit stabil und von der Zeitschrittweite unabhängig. Angesichts des hohen Rechenzeitaufwands der Regenerationssimulation im DPF muss für Rechnungen solcher kritischer Regenerationen zwischen dem Verlust an Genauigkeit und dem um den Faktor 20 niedrigeren numerischen Aufwand abgewogen werden.

5.2.2 Berechnung der Regeneration des Sintermetallfilters

Aus den dargestellten Voruntersuchungen zur numerischen Simulation des Rußschichtabbrands in der Versuchsgeometrie mit einem numerischen Gitter, welches um den Faktor 30 weniger Zellen aufwies als jenes der komplexen Geometrie einer Filtertasche des Sintermetall-DPF, kann geschlossen werden, dass die numerische Strömungsberechnung bei thermisch unkontrollierten Reaktionsbedingungen, die während sogenannter *Worst-Case*-Regenerationen auftreten können (siehe Abschnitt 1.2.1), nicht mit vertretbarem Rechenaufwand möglich ist. Ursächlich hierfür ist die Kombination aus großem numerischen Gitter (ca. 2 Mio. Zellen), kleiner Zeitschrittweite (ca. $1 \cdot 10^{-3}$ s zum Zeitpunkt des Durchgehens der Reaktion) und langer Versuchszeit (insgesamt mehrere hundert Sekunden).

Abschließend wurde das vollständige Modell des Sintermetall-DPF zur Simulation einer Regeneration bei moderaten Temperaturen eingesetzt. Zum experimentellen Abgleich standen Ergebnisse eines Versuchs am Motorprüfstand zur Verfügung.

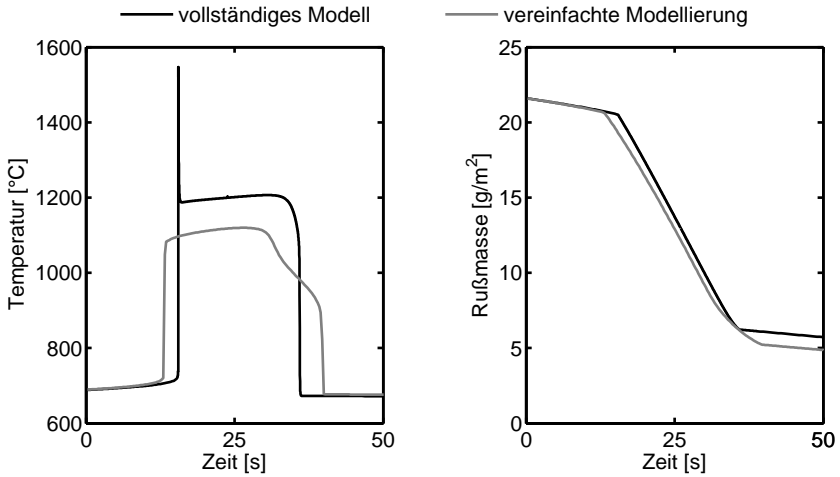


Abbildung 5.10: Vergleich der Simulationsergebnisse des vollständigen Modells mit Lösung der O_2 -Erhaltungsgleichung mit jenen des vereinfachten Modells der Stofftransportlimitierung für die thermisch unkontrollierte Reaktion

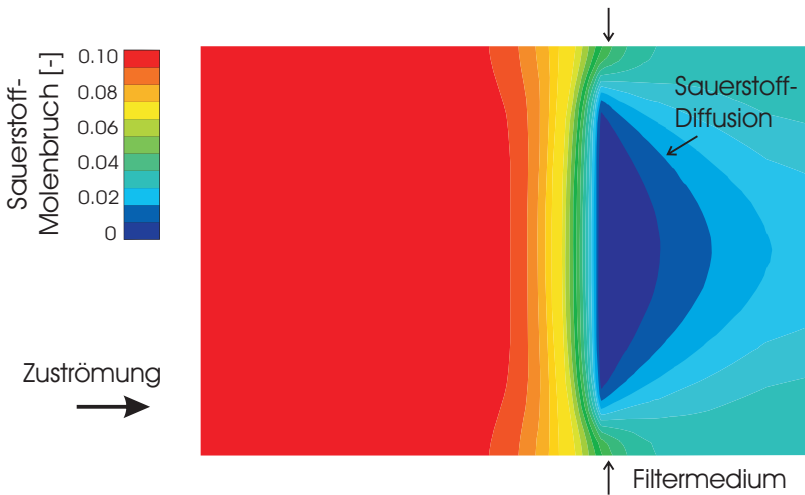


Abbildung 5.11: O_2 -Molenbruch in den Ergebnissen des vollständigen Modells während der thermisch unkontrollierten Reaktion bei $t = 16$ s

Rechengebiet und Randbedingungen

Der Regenerationsversuch am Motorprüfstand schloss sich unmittelbar an den in Abschnitt 3.2 dargestellten Beladungsversuch an. Durch zusätzliche Nacheinspritzung wurde bei konstantem Motorbetriebspunkt ($\dot{m} = 105 \text{ kg/h}$) die Temperatur vor Filter auf etwa 600°C erhöht und für 20 min gehalten.

Als Randbedingungen des Modells wurden am Eintritt die dort gemessenen Werte für Abgasmassenstrom, Sauerstoffgehalt und Temperatur, an der Außenseite des Gehäuses die Umgebungstemperatur von 30°C sowie ein Wärmeübergangskoeffizient von $5 \text{ W/m}^2\text{K}$ vorgegeben. Der Strahlungsaustausch zwischen Filtertasche und Gehäuse ist nur für den kleinen, nach außen gewandten Teil der Filtertasche relevant und wurde vernachlässigt.

Zunächst wurde eine Lösung für den stationären Ausgangszustand am Ende der Beladungsphase berechnet. In dem Strömungsmodell mit voll aufgelöstem Spacer konnte keine Lösung mit Berücksichtigung der Energiegleichung berechnet werden, da diese an dem numerischen Interface zwischen den beiden Gittern divergierte. Dieses Problem konnte trotz intensiver Bemühungen und Rücksprache mit dem Hersteller der Software nicht behoben werden, so dass auf ein vereinfachtes Modell zurückgegriffen wurde, bei dem der Spacer vernachlässigt und das Innere der Filtertasche als zusammenhängendes Strömungsgebiet modelliert wurde.

Für die numerische Berechnung des Aufheizvorgangs und der Regeneration betrug die Zeitschrittweite $5 \cdot 10^{-2} \text{ s}$. Die resultierende notwendige Rechenzeit lag im Mittel bei Parallelbetrieb von 10 Intel Xeon 2 GHz-Prozessoren bei etwa 1 Tag pro 10 Sekunden Realzeit.

Ergebnisse

Die Umströmung der Tasche im stationären Ausgangszustand wird durch die mit der Gastemperatur eingefärbten Stromlinien in Abbildung 5.12 veranschaulicht. Das Temperaturfeld an der Oberfläche der Filtertasche und im Gehäuse ist in Abbildung 5.13 dargestellt.

An der Vorderkante der Tasche und im hinteren Taschenzwischenraum ist der Wärmeeintrag aus der Strömung hoch, was sich in hoher Temperatur der Filtertasche in diesen Bereichen widerspiegelt. Die niedrigere Temperatur in der Taschenmitte ergibt sich aus der Überströmung mit Gas, welches bereits Wärme an die Gehäusewand abgegeben hat. Gut zu erkennen ist die Kühlung der Tasche im hinteren, äußeren Bereich durch Wärmeleitung in den Gehäuseflansch.

In Abbildung 5.14 ist der zeitliche Verlauf der Temperatur aus Messung und Simulation während des Aufheizvorgangs und der Regeneration an einer Mess-

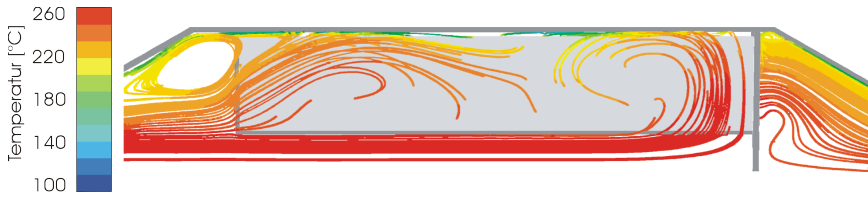


Abbildung 5.12: Stromlinien, eingefärbt mit der Gasttemperatur vor Beginn der Regeneration

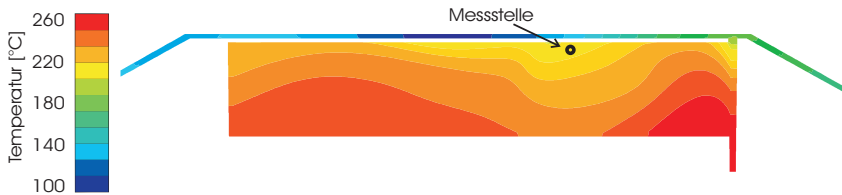


Abbildung 5.13: Temperatur der Festkörper vor Beginn der Regeneration

stelle dargestellt. Die Position der Messstelle im Inneren der Filtertasche, 120 mm stromauf des Filterflansches, radial außen ist in Abbildung 5.13 eingezeichnet. Ebenfalls dargestellt sind die Temperatur am Eintritt in das Rechengebiet und die Temperatur an der Messstelle während des identischen Motorprüfstandsversuchs mit unbeladenem Filter, wodurch der Einfluss der Exothermie des Rußabbrands auf den Temperaturverlauf verdeutlicht wird.

Der Verlauf der Temperatur in der Simulation weicht bereits zu Anfang vom Messergebnis ab. Die gemessene Temperatur weist eine deutliche Trägheit bezüglich des Temperatursprungs am Filtereinlass auf, während die Temperatur in der Simulation diesem schnell folgt. Es kann angenommen werden, dass für diese Diskrepanz die Vernachlässigung des Spacers verantwortlich ist, da dieser den konvektiven Wärmetransport im Tascheninneren unterbindet, so dass Wärmeleitung im Filtermedium und im Spacer der einzig verbleibende Wärmetransportmechanismus ist. Ein weiterer Effekt der Vernachlässigung des Spacers ist eine etwas geringere thermische Masse.

Dieser Fehler erklärt jedoch nicht das Ausbleiben einer nennenswerten Reaktionsexothermie im weiteren Verlauf, welche in den Messergebnissen bereits nach etwa 200 Sekunden deutlich erkennbar ist. Die Reaktionsraten bleiben in der Simu-

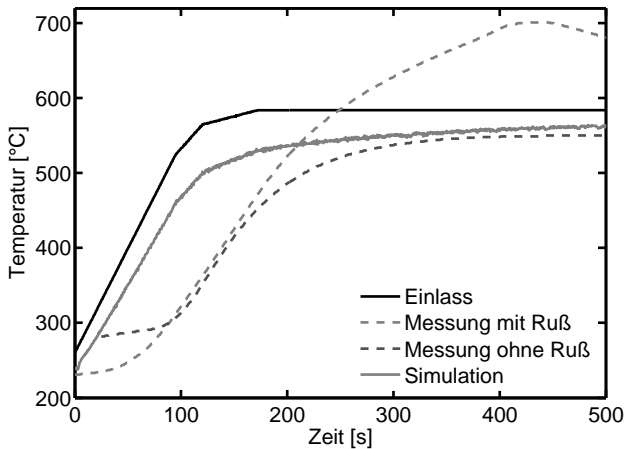


Abbildung 5.14: Vergleich zwischen Simulation und Messung anhand der Temperatur an einer Messstelle im Tascheninneren während der Filterregeneration

lation auch bei nahezu vollständig durchgeheiztem Filter klein, so dass die Abweichung nicht allein auf den fehlenden Spacer und die damit ungenaue Modellierung des Wärmetransports zurückzuführen sein kann. Untersuchungen der Sensitivität des Simulationsergebnisses bezüglich des Wärmeübergangskoeffizienten an der Gehäuseaußenseite, der Rußmasse und der Wärmeleitfähigkeit des Filtermediums zeigen, dass Fehler in diesen Parametern nicht für die Abweichung verantwortlich sein können.

Als verbleibende Quelle für die Abweichung verbleibt das Modell für die Abbrandrate, welches für CAST-Ruß bestimmt wurde und gute Übereinstimmung mit Messungen in der Versuchsgeometrie zeigt. Offensichtlich sind die Unterschiede zwischen CAST-Ruß und realem Diesel-Ruß bezüglich ihrer reaktionskinetischen Eigenschaften größer, als aufgrund der chemischen und physikalischen Ähnlichkeit der Partikel, untersucht in Abschnitt C, angenommen wurde. Für die betrachtete Regeneration bei moderater Temperatur - also einer Temperatur, die gerade ausreicht, um einen messbaren, exothermen Rußabbrand herbei zu führen - reicht eine geringe Abweichung der kinetischen Parameter für das beobachtete Ausbleiben der Exothermie aus.

Die Ergebnisse der durchgeführten Simulation können trotz der offensichtlichen Diskrepanz zur Messung einigen Aufschluss geben. Die geschilderten Ungenauigkeiten im Wärmetransport, so die Vernachlässigung der Strahlung an der Außenseite der Filtertaschen, der nicht unterbundene konvektive Wärmetransport im Tascheninneren sowie die unterschätzte Reaktionsrate bewirken eine Unterschätzung von Temperaturunterschieden im Filter. Trotzdem zeigten sich während des Aufheizens signifikante Temperaturunterschiede in der Filtertasche, wie in den Darstellungen der Festkörpertemperaturen 100 s bzw. 200 s nach Beginn der Reaktion in Abbildung 5.15 und Abbildung 5.16 zu erkennen ist.

Diese Temperaturunterschiede bewirken lokal unterschiedlich große Abbrandraten. In Abbildung 5.17 ist der Anteil des verbleibenden Rußes auf der Filteroberfläche zu einem Zeitpunkt 500 Sekunden nach Beginn der Regeneration dargestellt. Es ist zu erkennen, dass der Ruß zunächst im radial innen gelegenen Teil des Filters abbrennt, während vor allem im mittleren Teil der Filtertasche der Abbrand langsamer voranschreitet.

5.3 Diskussion

Die Herangehensweise dieser Arbeit war, die Reaktionskinetik des Rußabbrands in einem Experiment mit reduzierter geometrischer Komplexität und unter Verwendung von künstlichem Ruß zu bestimmen, welcher reproduzierbar mit Diesel-Ruß vergleichbare Eigenschaften aufweist und durch Filtration auf das Filtermedium aufgebracht wird, und diese Reaktionskinetik in ein detailliertes Strömungsmodell zu übertragen. Dieser Ansatz setzt jedoch voraus, dass entweder die gemessene Reaktionskinetik in identischer Weise auch für den realen Diesel-Ruß unter den Reaktionsbedingungen im realen Diesel-Partikelfilter gilt, oder aber der numerische Aufwand der Simulation einer Regeneration so gering ist, dass durch Anpassung der Kinetikparameter Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit den experimentellen Ergebnissen erzielt werden kann.

Wegen der komplexen Geometrie, der in Kapitel 2 motivierten hohen Anforderung an die Auflösung des numerischen Gitters und der großen Anzahl zu berechnender Zeitschritte scheidet letzteres Vorgehen aus. Die Abweichung der Simulationsergebnisse von den Messergebnissen zeigt, dass auch die Identität von künstlichem Ruß und Diesel-Ruß bezüglich ihrer Reaktionskinetik nicht gegeben ist. Daher sind mit dem erarbeiteten Regenerationsmodell einer Filtertasche lediglich Aussagen mit qualitativer Gültigkeit möglich.

Das Strömungsmodell muss, um in sinnvollen Rechenzeiten verwertbare Ergebnisse zu erzeugen, numerisch vereinfacht werden. Wichtigster Ansatzpunkt ist hier



Abbildung 5.15: Temperatur der Festkörper 100 Sekunden nach Beginn der Regeneration



Abbildung 5.16: Temperatur der Festkörper 200 Sekunden nach Beginn der Regeneration

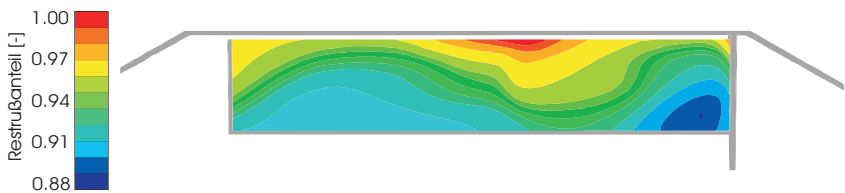


Abbildung 5.17: Anteil des verbleibenden Rußes 500 Sekunden nach Beginn der Regeneration

zunächst die Anzahl der Zellen des numerischen Gitters, wofür eine Weiterentwicklung der Behandlung der Gleichungen des Turbulenzmodells an der Oberfläche der Porosität notwendig ist, wie in Kapitel 2 diskutiert. Eine zusätzliche Verkleinerung des numerischen Gitters ergibt sich bei vereinfachter Berücksichtigung des Spacers und Annahme einer zusätzlichen Symmetrieebene in der Taschenmitte.

Die Verwendung des vereinfachten Abbrandmodells unter Vernachlässigung des Sauerstofftransports durch Diffusion aus Abschnitt 4.3.2 verringert die Komplexität des Strömungsmodells in dem hier dargestellten Fall einer nicht-kritischen Regeneration nur in dem Maße, dass die Lösung der Komponenten-Erhaltungsgleichungen entfällt. Der Vorteil der höheren numerischen Stabilität, der im Beispiel der kritischen Reaktion in Abschnitt 5.2.1 größere Zeitschritte ermöglichte, ist nicht gegeben.

Ein anspruchsvollerer Ansatz in Richtung einer weitergehenden Modellvereinfachung ist die Reduktion des Modells einer Filtertasche auf zwei räumliche Dimensionen, z. B. analog zu dem Modell aus [80] mit getrennter Betrachtung und numerischer Behandlung des Fluids stromauf und stromab des Filtermediums. Ein solches, axial-symmetrisches zweidimensionales Strömungsmodell könnte dann durch Übertragung auf drei Raumdimensionen die Berücksichtigung von Effekten erlauben, die bei der hier getroffenen Annahme von Periodizität vernachlässigt werden müssen, wie z. B. unsymmetrische Anströmung. Die größte Herausforderung bei einem solchen Modell ist die Wiedergabe des komplexen Strömungsfeldes mit radialen und axialen Geschwindigkeitskomponenten.

Die Ergebnisse der Regenerationssimulation in der realen Filtergeometrie zeigen, dass die Temperaturunterschiede zu Beginn der Regeneration maßgeblich durch die Anströmung der Filtertasche beeinflusst wird. Die ungleichmäßige Aufheizung der Filtertasche bewirkt lokal unterschiedliche Reaktionsgeschwindigkeiten. Die Rußschicht brennt bevorzugt im radial innen gelegenen Bereich des Filters ab, während der Ruß in der Nähe des Filtergehäuses deutlich langsamer abbrennt. Im Vergleich zu keramischen Wabenfiltern ist das hier vorliegende Regenerationsverhalten deutlich komplexer.

Aus den Ergebnissen lassen sich auch konstruktive Maßnahmen zur Vergleichmäßigung der Regenerationsrate auf der Taschenoberfläche ableiten. So bietet sich das Verschließen des freien Querschnitts im Zentrum des Filters oder auch die Integration des Diesel-Oxidationskatalysators in das Gehäuse des Partikelfilters an, eine bei keramischen Wabenfiltern gängige Einbauvariante. Beide Maßnahmen würden die bevorzugte Durchströmung im Zentrum des Filters und die damit verbundene Aufheizung von innen reduzieren. Die in dieser Arbeit entwickelten

Modelle lassen sich auf solche geometrisch veränderten Varianten übertragen und dienen damit als Werkzeug zur Auslegung.

Das Phänomen der *Worst-Case*-Regeneration, welches durch Simulation in einem geometrisch reduzierten Modell untersucht wurde, geht einher mit dem Durchgehen der Reaktion bei Zunahme der Reaktionsenthalpie über den abtransportierbaren Wärmestrom hinaus. Die Temperatur kann in diesem Fall in Bruchteilen von Sekunden auf über 1000 °C ansteigen, wobei die Reaktionsgeschwindigkeit durch das Sauerstoffangebot limitiert wird. In der fahrzeugtechnischen Anwendung lässt sich nach diesem Umschlag die Reaktion nicht mehr abbrechen; lediglich die maximale Temperatur im Diesel-Partikelfilter kann durch Begrenzung des Sauerstoffangebots gesenkt werden.

Anhang A

Überprüfung der Turbulenzmodellierung anhand eines Experiments aus der Literatur

Rechengebiet und Randbedingungen

Zur Überprüfung der in Abschnitt 2.1.4 eingeführten Modifikation der Turbulenzmodelle wurde ein in der Literatur dokumentiertes Experiment als Referenz verwendet. In dem Experiment von *Andersen et al.* [5] wurde die turbulente Überströmung einer gleichförmig durchströmten porösen Platte untersucht.

In Abbildung A.1 ist eine schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus dargestellt. Eine Beschreibung des Aufbaus ist in [104] zu finden, weitere Details in [65, 135] und eine Beschreibung der Versuchsdurchführung zur Ermittlung der Werte aus [5] in [6]. Der Strömungskanal weist eine Breite von 0,51 m (20 Zoll) und eine Länge von 2,44 m (8 ft) auf. Die Höhe des Kanals ist am Eintritt 0,15 m (6 Zoll), wobei die obere Begrenzung des Kanals mit einer Neigung zu versehen ist, um entlang der Lauflänge einen veränderlichen Druckgradienten einzustellen.

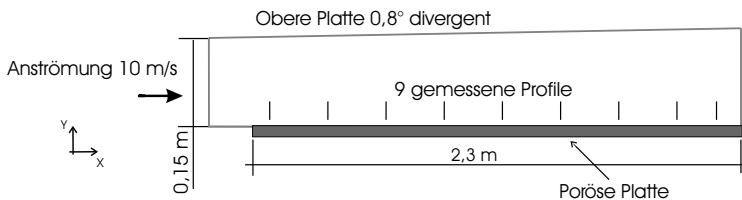


Abbildung A.1: Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus aus [6]

Die untere Begrenzung des Kanals ist eine poröse, hydraulisch glatte Platte. In dem untersuchten Experiment wurde diese mit einer Geschwindigkeit von 10 m/s angeströmt, während von unten Luft mit einer Geschwindigkeit von 0,037 m/s

gleichförmig eingeblasen wurde. Durch einen nicht näher beschriebenen Stolperdraht am Beginn der porösen Platte wurde die Strömung gezielt gestört, um einen definierten Ursprung der Grenzschicht zu erhalten. Die turbulente Intensität am Eintritt wird mit 1,2% angegeben [135].

Eine Unsicherheit bezüglich der Randbedingungen des Experiments stellt die genaue Ausführung der Plattenanströmung dar. In [104] führen die Autoren für ein anderes Experiment mit dem gleichen Aufbau aus, dass der Stolperdraht experimentell so ausgelegt wurde, dass der virtuelle Ursprung des Verlaufs der Impulsverlustdicke δ_2 der Grenzschicht [143]

$$\delta_2 = \int_0^\infty \left(1 - \frac{|\mathbf{v}|}{|\mathbf{v}_\infty|}\right) \frac{|\mathbf{v}|}{|\mathbf{v}_\infty|} dy \quad (\text{A.1})$$

ohne Einblasen mit der Vorderkante der porösen Platte bei $x = 0$ m zusammenfällt. Im Simulationsmodell des experimentellen Aufbaus wurde stromauf der porösen Platte eine undurchlässige Wand mit einer Länge von 0,23 m in das Modell eingeführt. Damit ergab sich für die gegebenen Randbedingungen und bei der Verwendung der modifizierten Turbulenzmodelle eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse für die Impulsverlustdicke mit den experimentellen Ergebnissen.

In [5] veröffentlicht sind Grenzschichtprofile der Geschwindigkeit (6-Sekunden-Mittelwerte) an neun Messstellen entlang der Kanallänge (bei $x = 0,051$ m, 0,254 m, 0,559 m, 0,864 m, 1,168 m, 1,473 m, 1,778 m, 2,083 m, 2,286 m), vermessen mit einem Hitzdraht-Anemometer (Platindraht, Durchmesser $5 \mu\text{m}$, Länge 2 mm). Der minimale Wandabstand der Messsonde beträgt etwa $10 \mu\text{m}$ [65].

Das Strömungsfeld in der Geometrie mit den beschriebenen Randbedingungen wurde mit *Fluent* berechnet. Der nicht veröffentlichte Winkel der oberen Platte wurde - wie im Experiment - so angepasst, dass der Druckgradient in Hauptströmungsrichtung verschwindet. Bei einem Winkel von $0,8^\circ$ stellte sich in der Rechnung ein Druckunterschied über die Lauflänge der Platte von 0,5 Pa ein, was für diese Untersuchung als ausreichend gering betrachtet wird.

Ergebnisse

In den Abbildungen A.2-A.5 sind Vergleiche mit den experimentellen Ergebnissen aus [5] für die beschriebenen Randbedingungen bei unterschiedlicher Modellierung der Turbulenz dargestellt. Verglichen werden das $k-\varepsilon$ - und das $k-\omega$ -Modell mit und ohne die in Abschnitt 2.1.4 diskutierten Modifikationen jeweils auf zwei unterschiedlichen Gittern. Bei dem feineren Gitter wird die Grenzschicht bis in die viskose Unterschicht fein aufgelöst ($y_{+\text{max}} = 0,35$), beim größeren Gitter liegt die wandnächste Zelle im Übergangsbereich zwischen der viskosen Unterschicht und

dem Bereich des logarithmischen Wandgesetzes ($y+$ der wandnächsten Zellen an den 9 Messstellen zwischen 15 und 23)¹.

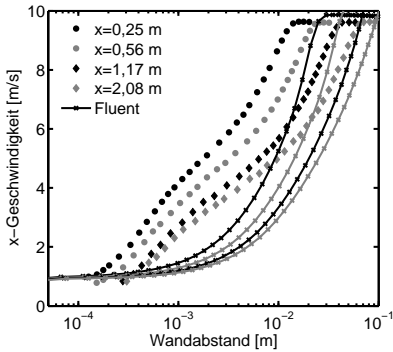
Für die unmodifizierten Turbulenzmodelle zeigen Abbildung A.2 und Abbildung A.4 eine schlechte Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung. Durch die überhöhte turbulente kinetische Energie ergibt sich eine zu hohe turbulente Viskosität und die Grenzschicht ist zu dick.

Die Übereinstimmung bei Verwendung des modifizierten k - ε -Turbulenzmodells in Abbildung A.3 ist deutlich verbessert. Der Vergleich der Ergebnisse mit feinerem und gröberem Gitter zeigt, dass es bei Verwendung dieses Modells nicht zwingend notwendig ist, die viskose Unterschicht der Grenzschicht aufzulösen. Die Anwendbarkeit dieses Modells ist bei mit dem Wandabstand gebildeter *Reynolds*-Zahl $Re_y < 200$ (siehe Gleichung (2.4)) gegeben.

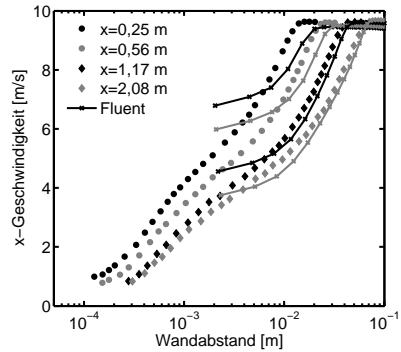
Die Ergebnisse der Strömungssimulation bei Verwendung des modifizierten k - ω -Turbulenzmodells zeigen in Abbildung A.5 für das feine Gitter die beste Übereinstimmung mit den Messergebnissen. Allerdings zeigen die Ergebnisse auf dem gröberem Gitter, dass dieses Modell eine höhere Anforderung an die Auflösung des Gitters stellt. Die Gitterauflösung muss so gewählt werden, dass mehrere Zellen in der viskosen Unterschicht liegen.

Bei Verwendung verschiedener Ausführungen der k - ε - und k - ω -Turbulenzmodelle, so der *RNG* und *realizable* benannten Versionen des k - ε -Modells sowie des k - ω -SST Modells [41], ergab sich kein signifikant unterschiedliches Ergebnis.

¹Zur Bestimmung von $y+ = \sqrt{\tau_W/\rho} y/\nu$ an der porösen Oberfläche ist die Bestimmung der lokalen Wandschubspannung τ_W notwendig. Da Messwerte für die Geschwindigkeit bis in die viskose Unterschicht vorliegen, kann diese als die laminare Schubspannung $\tau_W = -\mu du_x/dy$ angenommen werden. Hierbei wurden die Messwerte in unmittelbarer Wandnähe ($y < 20 \mu\text{m}$) außer Acht gelassen, da eine Störung der Messsonde durch die Wand vermutet wurde.

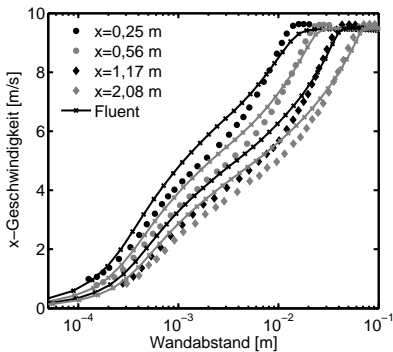


(a) feines Gitter

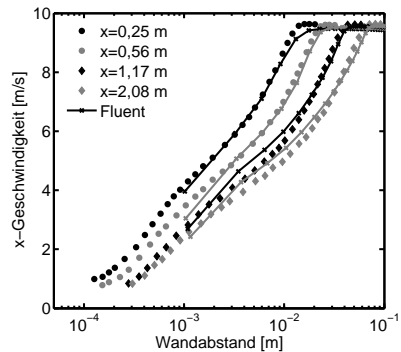


(b) grobes Gitter

Abbildung A.2: Grenzschichtprofile aus der Messung und berechnet mit $k-\varepsilon$ -Turbulenzmodell ohne Modifikation

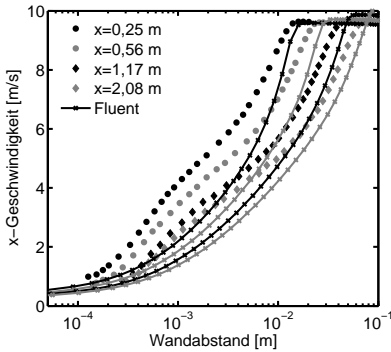


(a) feines Gitter

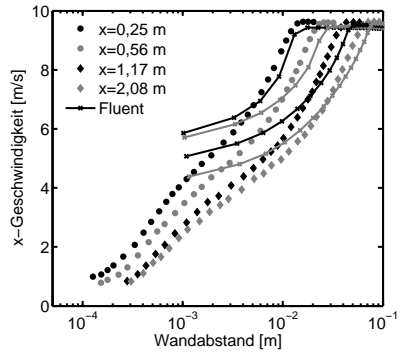


(b) grobes Gitter

Abbildung A.3: Grenzschichtprofile aus der Messung und berechnet mit $k-\varepsilon$ -Turbulenzmodell mit Modifikation

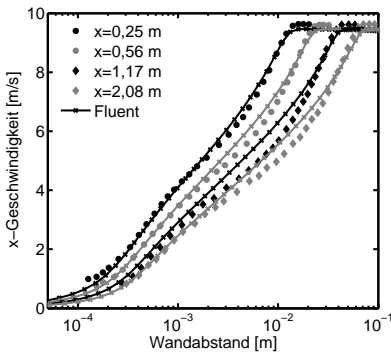


(a) feines Gitter

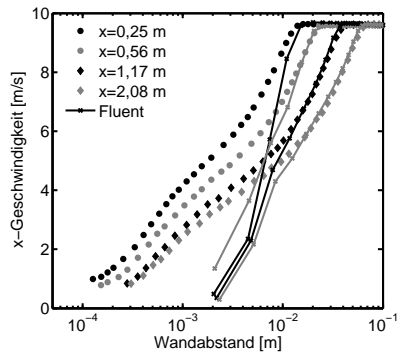


(b) grobes Gitter

Abbildung A.4: Grenzschichtprofile aus der Messung und berechnet mit $k\text{-}\omega$ -Turbulenzmodell ohne Modifikation



(a) feines Gitter



(b) grobes Gitter

Abbildung A.5: Grenzschichtprofile aus der Messung und berechnet mit $k\text{-}\omega$ -Turbulenzmodell mit Modifikation

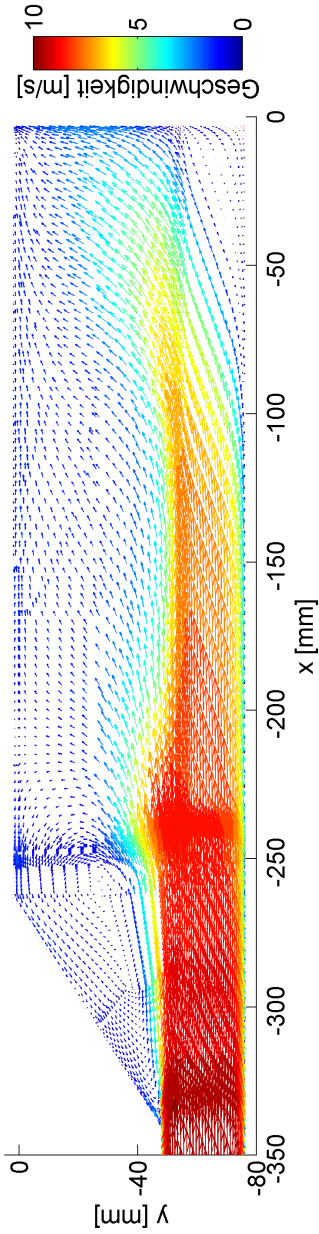
Anhang B

Ergänzende Ergebnisse zur Strömungsanalyse des Sintermetallfilters

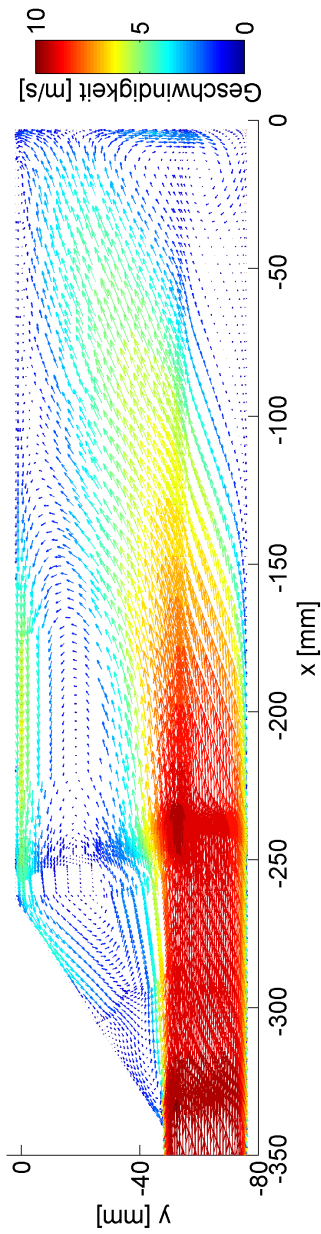
Die Notwendigkeit der Modifikationen der Turbulenzmodelle in Abschnitt 2.1.4 wird aus den im Folgenden dargestellten Ergebnissen des Strömungsmodells bei Verwendung der unmodifizierten Turbulenzmodelle deutlich. Das berechnete Strömungsfeld im Einzeltaschenexperiment bei Verwendung des unmodifizierten $k-\varepsilon$ -Modells bzw. $k-\omega$ -Modells ist in den Abbildungen B.1(a) und B.2(a) dargestellt, entsprechend Abbildung 2.10 in Abschnitt 2.3.1. In der Grenzschicht an der Oberfläche des Filtermediums ergibt sich wegen der fehlenden Wandbehandlung der Gleichungen der Turbulenzmodelle eine zu hohe turbulente kinetische Energie. Wegen der entsprechend hohen turbulenten Viskosität dringt die Strömung nicht in den Spalt zwischen Tasche und Seitenwand ein. Die Ablösung von der unteren Wand ist für beide Modelle deutlich verzögert. Eine weitere sichtbare Auswirkung ist der verringerte Volumenstrom, der aus dem Taschenspalt auf der oberen Seite zurück in die Querschnittserweiterung getragen wird. Die Rezirkulation ist im Vergleich zur Messung und zur Rechnung mit den modifizierten Modellen weniger stark ausgeprägt. Im oberen Spalt bildet sich kein sichtbarer Staupunkt aus.

Entsprechende Abweichungen des Strömungsmodells mit unmodifizierten Turbulenzmodellen von den Messergebnissen zeigen sich auch in Abbildung B.3 für den relativen Wanddruck entsprechend Abbildung 2.12 in Abschnitt 2.3.1. Zum Vergleich ist in Abbildung B.4 die entsprechende Darstellung für das Strömungsmodell mit modifiziertem $k-\omega$ -Modell gezeigt.

Wegen der *Reynolds*-Zahl stromauf der Filtertasche von etwa $1 \cdot 10^4$ kann angenommen werden, dass die Strömung dort turbulent ist. Tatsächlich zeigt sich, dass ohne Verwendung eines Turbulenzmodells das Lösungsverfahren nicht zu einer stationären Lösung konvergiert. Im Bereich der Querschnittserweiterung ist die Strömung instabil. Die turbulente Viskosität bewirkt bei Verwendung eines Turbulenzmodells eine Stabilisierung des numerischen Verfahrens, wodurch die Berechnung einer stationären Lösung ermöglicht wird, die gut mit den zeitlich



(a) *Fluent*-Rechnung mit $k-\epsilon$ -Modell



(b) *Fluent*-Rechnung mit modifiziertem $k-\epsilon$ -Modell

Abbildung B.1: Auswirkung der Modifikation des $k-\epsilon$ -Turbulenzmodells auf das berechnete Strömungsfeld im Einzel-taschenexperiment

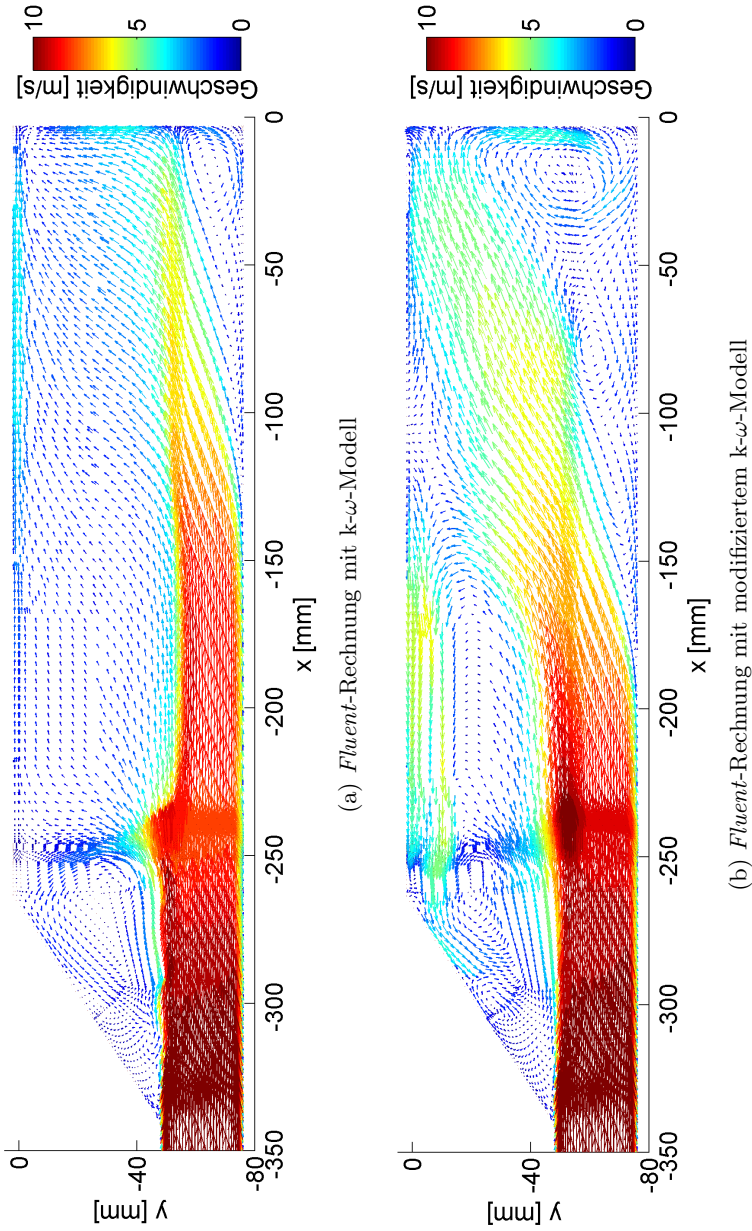
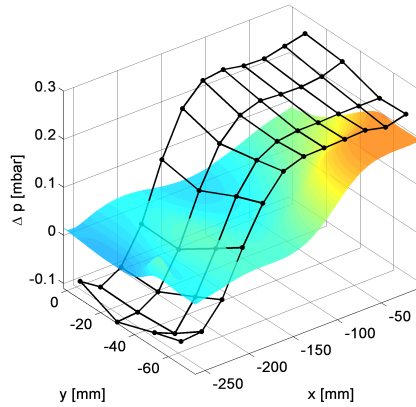
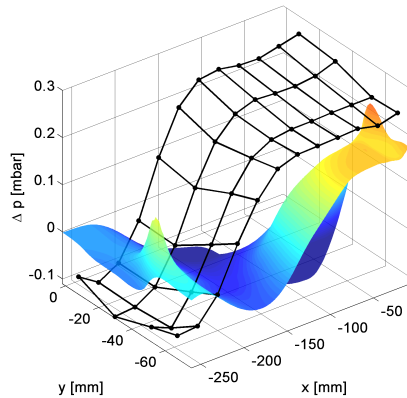


Abbildung B.2: Auswirkung der Modifikation des $k-\omega$ -Turbulenzmodells auf das berechnete Strömungsfeld im Einzel-taschenexperiment



(a) $k-\varepsilon$ -Modell



(b) $k-\omega$ -Modell

Abbildung B.3: Ergebnisse für den relativen Wanddruck mit den nicht modifizierten Turbulenzmodellen für $\dot{m} = 12 \text{ kg/h}$, die Messwerte sind als verbundene Punkte, die Simulationsergebnisse als farbige Fläche dargestellt.

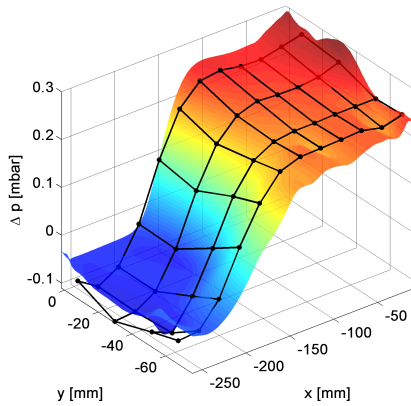


Abbildung B.4: Vergleich der Ergebnisse für den relativen Wanddruck aus Messung und Simulation mit dem modifizierten k - ω -Modell für $\dot{m} = 12 \text{ kg/h}$, die Messwerte sind als verbundene Punkte, die Simulationsergebnisse als farbige Fläche dargestellt.

gemittelten Messergebnissen übereinstimmt. Ob dies ebenfalls durch die zeitliche Mittelung der Ergebnisse einer instationären Rechnung ohne Turbulenzmodell zu erreichen wäre, wurde nicht untersucht.

Anhang C

Eigenschaften von CAST-Ruß im Vergleich zu Diesel-Ruß

Als Rußquelle für die experimentellen Untersuchungen zur Abbrandgeschwindigkeit von Rußschichten in Abschnitt 4.2 und zum Druckverlust in Abschnitt E.2 wurde der *CAST* Rußgenerator (englisch *Combustion Aerosol Standard*) der ersten Generation [63] verwendet. Die Konstruktion des Brenner-Kopfes ist in Abbildung C.1 schematisch gezeigt [63].

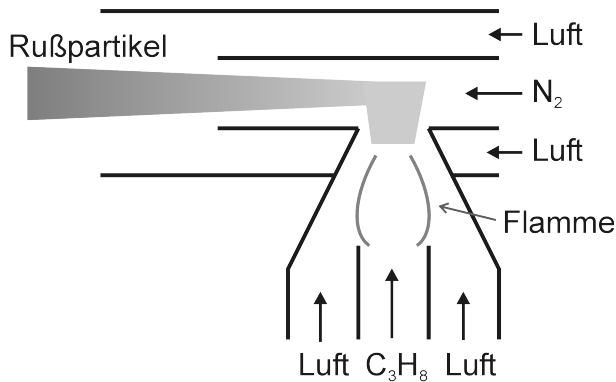


Abbildung C.1: Schematische Darstellung des *CAST*-Brenners nach [63]

Propan (C_3H_8) als Brennstoff wird mit synthetischer Luft, also Luft mit definierten Mengenanteilen Stickstoff und Sauerstoff, verbrannt. Die entstehende Diffusionsflamme wird in einem festen Abstand von der Brennermündung mit Stickstoff erstickt (englisch *Quenching*), so dass die Oxidation der Rußteilchen unterbrochen wird, und diese im Abgas verbleiben [60]. Der Kontakt zwischen Abgasstrom und den Brennerwänden wird durch Spülluft unterbunden. Das Abgas wird durch eine Pumpe vom Brenner abgesaugt und durch einen Filter an

die Umgebung abgegeben. Aus dem Abgasstrom kann nun entweder über eine Verdünnereinheit ein kleiner Volumenstrom mit einstellbarer Rußkonzentration, oder durch eine zusätzliche externe Pumpe ein größerer Volumenstrom mit hoher Rußkonzentration entnommen werden. Letztere Möglichkeit wurde für die vorliegenden Untersuchungen gewählt.

Durch Variation der zugeführten Mengen an Brennstoff, Oxidationsmittel, Spülluft und Quenchgas lassen sich die Eigenschaften der produzierten Partikel verändern, insbesondere die Partikelgröße und -konzentration und die chemische Zusammensetzung [61, 62, 167]. In Tabelle C.1 sind die Eigenschaften für die voreingestellten Betriebspunkte aufgeführt.

Die angegebenen Werte für die Primärpartikelgröße d_p stammen aus Messungen, die an dem vorliegenden *CAST* mit einem *LI²SA*-Gerät durchgeführt wurden [140], welches das Messprinzip der laserinduzierten Glühtechnik (siehe z. B. [29]) verwendet. Die Werte stimmen mit jenen in der Literatur für Diesel-Ruß angegebenen von 14 nm bis 50 nm [59, 98, 112] überein.

Die Angaben über den Anteil elementaren Kohlenstoffs (englisch *elemental carbon EC*) in Tabelle C.1 wurden vom Hersteller bereitgestellt [64].

Betriebspunkt	$\bar{d}_{1,0}$	$\bar{d}_{m,0}$	$d_{50,0}$	σ_g	d_p	Anteil EC
33	68 nm	76 nm	63 nm	1.56	-	90 %
85	99 nm	111 nm	90 nm	1.59	19 nm	94 %
133	127 nm	143 nm	116 nm	1.60	22 nm	96 %
160	168 nm	190 nm	153 nm	1.62	35 nm	98 %
200	204 nm	234 nm	183 nm	1.68	42 nm	98 %

Tabelle C.1: Eigenschaften des *CAST*-Rußes

Agglomerateigenschaften

Die in Tabelle C.1 aufgeführten Informationen über die Agglomeratgrößenverteilung wurden durch Messungen mit dem *SMPS (DMA Modell 3081* [153] und *CPC Modell 3010* [151]) ermittelt. Bei Verwendung des in Abschnitt 3.1.1 vorgestellten Zusammenhangs zwischen Mobilitätsdurchmesser und Agglomeratdichte nach Gleichung (3.5) ist die Bestimmung der Massenverteilung aus der gemessenen An-

zahlverteilung q_0 möglich. Da nach Gleichung (3.5) $m_{\text{agg}} \sim d_m^{1/\kappa}$ gilt, folgt für den massengemittelten Mobilitätsdurchmesser

$$\bar{d}_{m,0} = \sqrt[1/\kappa]{\int_0^\infty d_m^{1/\kappa} q_0(d_m) d d_m} \quad (\text{C.1})$$

mit $\kappa = 0,44$ [157, 158].

Harris und Maricq untersuchen in [50] die Partikelgrößenverteilung von Ruß verschiedener Dieselmotoren in unterschiedlichen Betriebspunkten und kommen zu dem Ergebnis, dass die anzahlgemittelten Mobilitätsdurchmesser der Rußpartikel im Abgas zwischen 60 nm und 120 nm schwanken, die Partikelgrößenverteilungen jedoch in allen Fällen gut einer logarithmischen Normalverteilung entsprechen. In Abbildung C.2 aus [50] entspricht $h = d_m/d_{50,0}$ dem mit dem anzahlbezogenen Mediandurchmesser $d_{50,0}$ normierten Mobilitätsdurchmesser und m der logarithmischen Anzahlverteilungsdichte

$$m = q_0^* = d_m q_0. \quad (\text{C.2})$$

Die geometrische Standardabweichung σ_g wird für die durchgeführten Fahrzeugversuche zu 1,68, für Motorprüfstandsversuche zu ungefähr 1,8 angegeben [50].

Mit dem SMPS wurde die Partikelgrößenverteilung für verschiedene *CAST*-Betriebspunkte untersucht, um die Vergleichbarkeit des synthetischen Rußes mit Diesel-Ruß zu überprüfen. In Abbildung C.3 sind die logarithmischen Anzahlverteilungsdichten über dem normierten Mobilitätsdurchmesser für die fünf *CAST*-Betriebspunkte aus Tabelle C.1 dargestellt. Die Verteilungen wurden aus jeweils fünf SMPS-Messungen gewonnen.

Es ist zu erkennen, dass die Verteilung im Größenbereich um den Mediandurchmesser einer logarithmischen Normalverteilung entspricht. Bei relativ zum Mediandurchmesser kleinen und großen Partikeln sind geringe Abweichungen von der Normalverteilung zu erkennen. Die Breite der Verteilung für den 200 nm-Betriebspunkt stimmt mit der von Harris und Maricq für Diesel-Ruß angegebenen überein. Bei den Betriebspunkten mit kleinerer mittlerer Partikelgröße ist die Verteilung etwas schmaler. Bezüglich der Agglomeratgrößenverteilung ist akzeptable Vergleichbarkeit zwischen *CAST*- und Diesel-Ruß gegeben.

Chemische Zusammensetzung

Die Zusammensetzung des *CAST*-Ruß unterscheidet sich von Diesel-Ruß in Bezug auf den Kohlenwasserstoffgehalt. *CAST*-Ruß ist, insbesondere bei Betriebspunkten mit größeren Agglomeraten „trocken“, d. h. der Kohlenwasserstoffgehalt

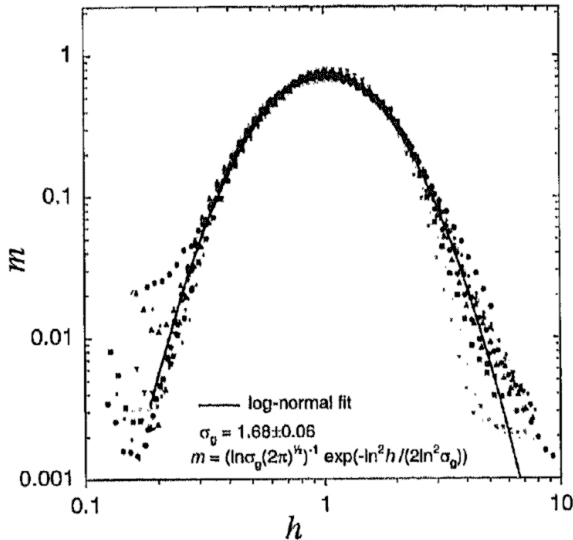
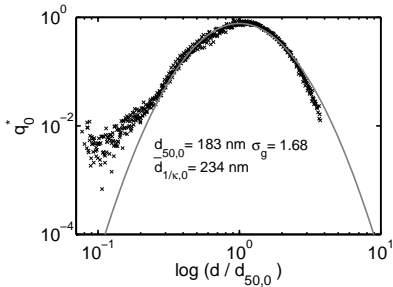


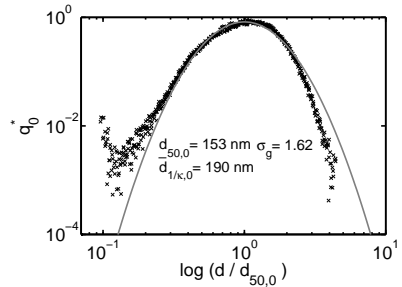
Abbildung C.2: Normierte Anzahlverteilungsdichte des Mobilitätsdurchmessers von Diesel-Ruß, Abbildung aus [50]

ist gering (siehe Tabelle C.1). Auf der Oberfläche von Diesel-Ruß können dagegen flüssige Kohlenwasserstoffe adsorbiert sein.

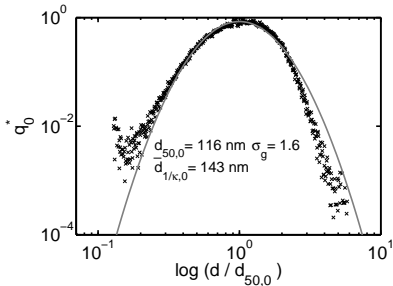
Für die isothermen Abbrandversuche in Abschnitt 4.2 wird der *CAST*-Ruß auf die Abbrandtemperatur im Bereich zwischen 550 °C und 700 °C aufgeheizt. Bei diesen Temperaturen ist mit einem Verbleib von Kohlenwasserstoffen mit einer maximalen Siedetemperatur von 250 °C in flüssiger Phase nicht zu rechnen. In einer Untersuchung bei der *Robert Bosch GmbH* zeigte sich, dass Diesel-Ruß und *CAST*-Ruß bei Temperaturen um 400 °C keine Unterschiede bezüglich der Abbrandraten mit NO₂ aufweisen [114]. *Stratakis* beobachtet in [145] keinen Einfluss von Kohlenwasserstoffgehalten zwischen 0% und 12% auf die nicht-katalytische Regenerationsrate in Motorversuchen. Aus diesem Grund wurde für die Reaktionsrate mit Sauerstoff ein ähnliches Verhalten von *CAST*-Ruß und Diesel-Ruß erwartet.



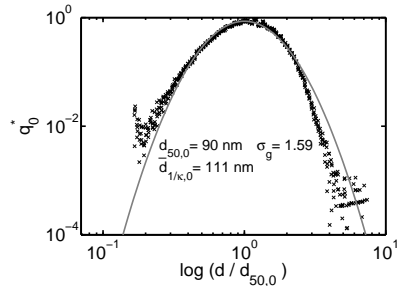
(a) *CAST*-Betriebspunkt 200



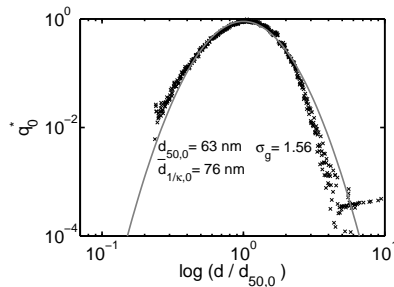
(b) *CAST*-Betriebspunkt 160



(c) *CAST*-Betriebspunkt 133



(d) *CAST*-Betriebspunkt 85



(e) *CAST*-Betriebspunkt 33

Abbildung C.3: Normierte Anzahlverteilungsdichte des Mobilitätswertes von *CAST*-Ruß aus Messung mit dem SMPS, entsprechend der Auftragung aus Abbildung C.2

Anhang D

Permeabilitätsmodelle in der Literatur

Die homogene und isotrope Permeabilität eines porösen Körpers lässt sich aus einer Messung des Druckverlusts über eine Scheibe bekannter Dicke bei gleichmäßiger, flächennormaler Durchströmung bestimmen. Darüber hinaus gibt es Modelle, die ausgehend von einer Betrachtung der Strömung auf mikroskopischer Ebene Vorhersagen über die Permeabilität in Abhängigkeit zum Teil direkt messbarer Strukturparameter treffen.

Kapillarmodelle

Bei den Kapillarmodellen wird die Durchströmung eines Porenkanals als der für die Strömung charakteristische mikroskopische Vorgang betrachtet. Für die voll ausgebildete, laminare Strömung in einem zylindrischen Porenkanal des Durchmessers d ergibt sich der Druckverlust entsprechend der *Hagen-Poiseuille*-Gleichung zu

$$-\nabla p = \frac{32\mu}{d^2} |\mathbf{v}_{\text{Pore}}|. \quad (\text{D.1})$$

mit der Porengeschwindigkeit \mathbf{v}_{Pore} . Für die flächenspezifische Anzahl der Kanäle n'' , die Porosität $\varepsilon = n''\pi d^2/4$ und die Anströmgeschwindigkeit \mathbf{v} gilt:

$$\mathbf{v}_{\text{Pore}} = \frac{4\mathbf{v}}{n''\pi d^2} = \frac{\mathbf{v}}{\varepsilon}. \quad (\text{D.2})$$

Aus dem Vergleich der Gleichungen (D.1) und (D.2) mit dem *Darcy*-Gesetz ergibt sich die Permeabilität zu

$$K = \frac{\varepsilon d^2}{32}. \quad (\text{D.3})$$

Für reale poröse Körper trifft der in Gleichung (D.3) dargestellte Zusammenhang zwischen der Permeabilität und den Strukturparametern Porosität und Porengröße meist nicht zu. Als *Carman-Kozeny-Theorie* bezeichnet wird die Erweiterungen des einfachen Porenmodells um eine Verwindung τ und einen Form-

Parameter k_0 sowie die Verwendung des aus der volumenspezifischen Oberfläche A''' abgeleiteten hydraulischen Durchmessers [24, 38]

$$d_h = \frac{4 \varepsilon}{A''' (1 - \varepsilon)}. \quad (\text{D.4})$$

Der Formparameter k_0 ist für kreisförmige Querschnitte 2, für andere Querschnittsformen nimmt er Werte zwischen 2,0 und 2,5 an [67]. Für die Permeabilität ergibt sich

$$K = \frac{\varepsilon d_h^2}{16 k_0 \tau^2} = \frac{\varepsilon d_h^2}{16 k_K} = \frac{\varepsilon^3}{k_K (1 - \varepsilon)^2 A'''^2}. \quad (\text{D.5})$$

Hierbei ist k_K die sogenannte *Kozeny-Konstante*. Für monodisperse Schüttungen aus Kugeln des Durchmessers d gilt $A''' = 6/d$. Für solche ergibt sich bei der auf experimentellen Ergebnissen beruhenden Abschätzung $k_K = 5$ die oft für Schüttungen verwendete *Carman-Kozeny-Gleichung*

$$K = \frac{\varepsilon^3}{180 (1 - \varepsilon)^2} d^2. \quad (\text{D.6})$$

Die *Carman-Kozeny-Gleichung* zeigt teilweise gute Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen an Kugelschüttungen, allerdings nur für Porositäten unterhalb etwa 0,6. Für Porositäten oberhalb von 0,95 wird eine exponentielle Zunahme der *Kozeny-Konstanten* beobachtet [88].

Widerstands-Modelle

Bei den sogenannten Widerstands- oder *Drag-Modellen* wird als zu Grunde liegender mikroskopischer Vorgang die Umströmung eines Partikels einer Schüttung betrachtet, im einfachsten Fall einer einzelnen Kugel. Nach dem *Stokes-Gesetz* ist die Kraft F , welche die schleichende Strömung auf eine solche Kugel ausübt

$$|\mathbf{F}| = 3\pi\mu d |\mathbf{v}|. \quad (\text{D.7})$$

In einer aus N Partikeln bestehenden Schüttung der Dicke H , der Querschnittsfläche A und der Porosität ε gilt für das Partikelvolumen

$$(1 - \varepsilon) AH = N \frac{\pi d^3}{6}. \quad (\text{D.8})$$

Die auf jedes der Partikel wirkende *Stokes-Kraft* nach Gleichung (D.7) steht im Gleichgewicht mit der Druckänderung, so dass gilt:

$$3N\pi\mu d |\mathbf{v}| = \Delta p A. \quad (\text{D.9})$$

Wird für diese Druckdifferenz Δp das *Darcy*-Gesetz eingesetzt, ergibt sich die Permeabilität der Schüttung zu

$$K = \frac{1}{18} \frac{d^2}{1 - \varepsilon}. \quad (\text{D.10})$$

Dieser einfache Ansatz gibt die Widerstandskraft einer Kugelschüttung noch nicht ausreichend wieder, da in Gleichung (D.7) der Einfluss der Schüttung auf die Umströmung des Einzelpartikels nicht berücksichtigt ist. In verschiedenen Modellen wird ein Faktor L eingeführt, um welchen die *Stokes*-Kraft kleiner ist als die Widerstandskraft eines Partikels in einer Schüttung der Porosität ε . Der Faktor L strebt für zunehmende Porosität gegen den Wert 1. Die Permeabilität ergibt sich damit zu

$$K = \frac{L(\varepsilon)}{18} \frac{d^2}{1 - \varepsilon}. \quad (\text{D.11})$$

Grundlage der Modelle ist die analytische oder numerische Lösung der *Stokes*-Gleichungen für die Kugelumströmung. Das betrachtete Rechengebiet ist oft eine sogenannte Einheitszelle um die Einzelkugel, deren Durchmesser D entsprechend der Porosität ε der betrachteten Schüttung zu

$$D = d(1 - \varepsilon)^{-1/3} \quad (\text{D.12})$$

gewählt wird.

Happel verwendet in [47] Scherfreiheit auf der Oberfläche der Einheitszelle als Randbedingung und erhält durch analytische Lösung für den Faktor L mit $\xi = d/D = (1 - \varepsilon)^{1/3}$:

$$L = \frac{3 - 9/2\xi + 9/2\xi^5 - 3\xi^6}{3 + 2\xi^5}. \quad (\text{D.13})$$

Kuwabara löst in [87] die *Stokes*-Gleichungen analytisch mit verschwindender Wirbelstärke auf der Oberfläche der Einheitszelle als Randbedingung. Daraus ergibt sich

$$L(\xi) = \left(1 + \frac{51}{50}\xi + \frac{3}{50}\xi^2 - \frac{7}{25}\xi^3 + \frac{2}{5}\xi^4 + \frac{12}{25}\xi^5 + \frac{6}{25}\xi^7 + \frac{2}{25}\xi^8\right)^{-1} \cdot (1 - \xi)^3 \cdot \left(1 + \frac{6}{5}\xi + \frac{3}{5}\xi^2 + \frac{1}{5}\xi^3\right)^2. \quad (\text{D.14})$$

Neale und Nader umschließen in [106] die oben beschriebene Einheitszelle mit einem unendlich ausgedehnten, porösen Körper. Innerhalb der Einheitszelle werden die *Stokes*-Gleichungen gelöst. In der umschließenden Porosität wird die *Brinkmann-Erweiterung* für die Impulsgleichung verwendet,

$$-\frac{\mu}{K} \mathbf{v} + \mu \nabla^2 \cdot \mathbf{v} = \nabla p. \quad (\text{D.15})$$

Für den Faktor L ergibt sich schließlich mit $\alpha = d/2\sqrt{K}$ und $\beta = \alpha(1 - \varepsilon)^{1/3}$:

$$\begin{aligned} L = 4 & (-6\beta^6 - 21\beta^5 - 45\beta^4 - 45\beta^3 + 5\beta^4\alpha^2 + 5\beta^3\alpha^2 + \beta\alpha^5 + \alpha^5) \cdot \\ & (-4\beta^6 - 24\beta^5 - 180\beta^4 - 180\beta^3 + 9\beta^5\alpha + 45\beta^4\alpha \\ & - 10\beta^3\alpha^3 + 180\beta^3\alpha - 30\beta^2\alpha^3 + 9\beta\alpha^5 - 4\alpha^6 + 9\alpha^5)^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{D.16})$$

Der so bestimmte Faktor L hängt von der resultierenden Permeabilität ab und wird iterativ berechnet.

Phänomenologische Modelle

Zusätzlich gibt es rein phänomenologische Modelle, die den Verlauf der Permeabilität in Abhängigkeit von Strukturparametern vorhersagen. So schlagen *Molerus et al.* in [105] auf Basis von Messungen an Kugelschüttungen mit Porositäten im Bereich 35%-70% aus [127] für die Permeabilität einen Ansatz vor, der sich als Korrekturterm für die Permeabilität aus dem *Stokes*-Gesetz entsprechend Gleichung (D.11) interpretieren lässt:

$$K = \frac{\varepsilon^{4,55} d^2}{22,4(1 - \varepsilon)} \Leftrightarrow L = \frac{18}{22,4} \varepsilon^{4,55} \quad (\text{D.17})$$

Di Felice sieht in [34] ebenfalls eine Korrektur der Widerstandskraft auf das Einzelpartikel vor, so dass

$$L = \varepsilon^\beta, \quad (\text{D.18})$$

wobei der Exponent β in Abhängigkeit von der Partikel-*Reynolds*-Zahl zwischen 3 und 3,7 schwankt.

Davies schlägt in [30] für zylindrische Fasern folgenden Zusammenhang vor:

$$K = \frac{1}{64} d^2 \frac{1}{(1 - \varepsilon)^{1,5} (1 + 56(1 - \varepsilon)^3)}, \quad (\text{D.19})$$

wobei d hier den Faserdurchmesser bezeichnet. *Kim und Yuan* verwenden in [68] dieses Modell zur Beschreibung des Zusammenhangs von Porosität und Permeabilität innerhalb eines Rußagglomerats (siehe Abschnitt 3.1, Seite 39).

Vergleich der Permeabilitätsmodelle

Alle vorgestellten Modelle weisen eine quadratische Abhängigkeit der Permeabilität von einer charakteristischen Länge der porösen Struktur auf. Diese kann ein charakteristischer Porendurchmesser, eine Partikelgröße oder die reziproke volumenspezifische Oberfläche sein. Darüber hinaus ist die Porosität ein wichtiger Strukturparameter.

In Abbildung D.1 ist ein Vergleich der vorgestellten Permeabilitätsmodelle mit Messungen aus der Literatur dargestellt. Aufgetragen ist das Verhältnis der *Stokes*-Widerstandskraft zum Widerstand des porösen Körpers - der Faktor L in der Beschreibung der Widerstandsmodelle. Der Grenzwert der Widerstandsmodelle (*Kuwabara* [87], *Happel* [47], *Neale und Nader* [106]) für $\varepsilon \rightarrow 1$ ist a priori = 1. Der nach dem *Carman-Kozeny*-Modell für diesen Fall verschwindende Widerstand ist ein unphysikalischer Grenzwert.

Die dargestellten Messungen von *Gupte* [127] wurden an fixierten Schüttungen von Kugeln mit einem Durchmesser von $677 \mu\text{m}$ bei Durchströmung mit Öl bzw. Luft vorgenommen. Die Ergebnisse von *Guyon et al.* [46] wurden an versinterten, binären Mischungen aus Glaskugeln mit Durchmessern von $d_1 = 88 - 104 \mu\text{m}$ bzw. $d_2 = 297 - 354 \mu\text{m}$ bei Durchströmung im Bereich der Gültigkeit des *Darcy*-Gesetzes ermittelt. Als für die Schüttungen charakteristische Länge wird die reziproke volumenspezifische Oberfläche angegeben. Das Ergebnis von *Neale und Nader* [106] wurde an einer Schüttung aus 1 mm-Stahlkugeln der Porosität 37,9% bei Durchströmung mit Wasser gemessen. *Kyan et al.* messen in [88] den Druckverlust von Faserschichten mit Faserdurchmessern von $8 - 28 \mu\text{m}$ bei Durchströmung mit Wasser-Alkohol-Mischungen. Die dargestellten Daten zu diesem Experiment wurden in [97] aufbereitet. Ergebnisse für Sedimentationsgeschwindigkeiten von Sandpartikeln mit einem Durchmesser von etwa $100 \mu\text{m}$ aus einem Experiment von *McNown et al.* werden in [47] präsentiert.

Die Ergebnisse in Abbildung D.1 für das Sintermetallhalbzeug, das im Verbundmaterial des Sintermetall-DPF eingesetzt wird, stammen aus Untersuchungen bei der Robert Bosch GmbH [150]. Die Bestimmung der Porosität erfolgt archimedisch aus dem Verdrängungsvolumen in Wasser, als charakteristische Länge wird nach [76] der Durchmesser des kugelförmigen Partikels verwendet, welches die gleiche Oberfläche aufweist wie die als zylindrisch angenommene Pore:

$$l = \frac{3}{2} \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} d. \quad (\text{D.20})$$

Hierbei ist d der Mediandurchmesser der Poren aus Messung mittels Quecksilberporosimetrie.

Zusätzlich zu diesen Messergebnissen sind in Abbildung D.1 Ergebnisse von *Larson und Higdon* dargestellt. In [92] zeigen sie Lösungen der *Stokes*-Gleichungen für umströmte Kugeln bei unterschiedlicher Porosität. Dargestellt sind die Ergebnisse für die kubisch-flächenzentrierte Anordnung der Kugeln.

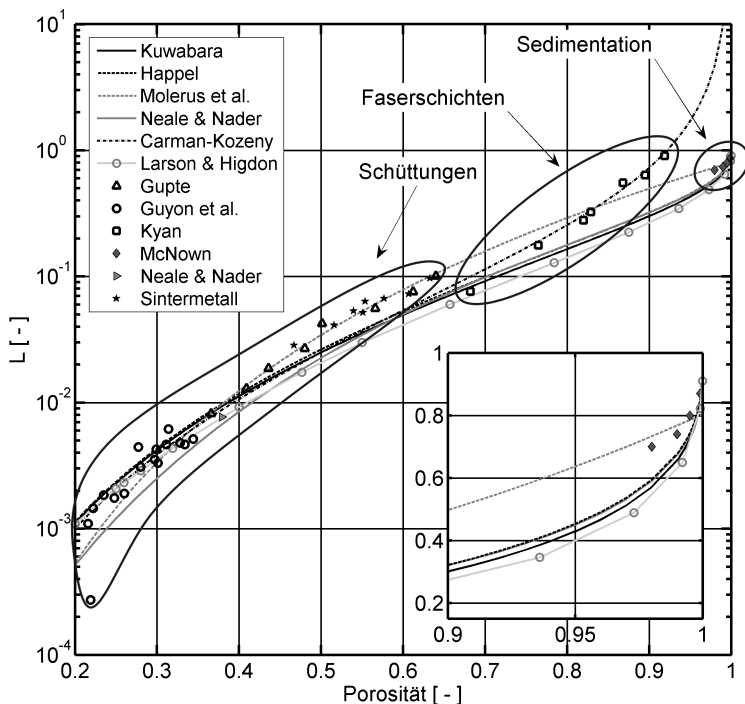


Abbildung D.1: Vergleich von Permeabilitätsmodellen mit experimentellen Ergebnissen

Die Widerstandsmodelle von *Kuwabara* und *Happel* unterscheiden sich für alle Porositäten um weniger als 8%. Nur bei Porositäten niedriger als 60% weicht das Widerstandsmodell von *Neale und Nader* von diesen ab und zeigt eine etwas schlechtere Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen von *Guyon et al.* und *Gupte*. In diesem Porositätsbereich entsprechen die *Kuwabara*- und die

Happel-Ergebnisse auch denen des *Carman-Kozeny*-Modells mit einer *Kozeny*-Konstanten von 5. Die maximale Abweichung beträgt 13%.

Für hohe Porosität $\varepsilon > 90\%$ stimmen die Widerstandsmodelle miteinander überein. Die extrapolierten Vorhersagen des Ansatzes von *Molerus et al.* für L liegen darüber, wobei der Grenzwert von $L = 1$ für $\varepsilon = 1$ unterschritten wird. Die *McNown*-Messungen für Sedimentation von Sandpartikeln werden von beiden Modelltypen mit ähnlicher Qualität wiedergegeben. *Kyans* Messungen an Faserschichten korrelieren besser mit dem *Carman-Kozeny*-Modell, was darauf hindeutet dass sich Fasern bei hohen Porositäten anders verhalten als Partikel.

Anhang E

Theoretische und experimentelle Untersuchung des Strömungswiderstands der Rußschicht

E.1 Modellierung

Der Strömungswiderstand der Rußschicht $(\rho_S K)_{\text{Ruß}}$ nach Gleichung (3.19) kann sich je nach der Art des Rußes und den Bedingungen während der Filtration stark unterscheiden. Sowohl Permeabilität K als auch Schüttdichte ρ_S der Rußschicht lassen sich als Funktion der Porosität ε ausdrücken. Für den Zusammenhang zwischen Porosität und Permeabilität liegen in der Literatur Modelle vor, welche in Anhang D diskutiert wurden. Wegen der besonderen Eignung für poröse Körper mit hoher Porosität und wegen der hohen Anschaulichkeit der Ableitung vom Widerstand eines Einzelpartikels wird im Folgenden eine Formulierung für diesen Zusammenhang gewählt, die den sogenannten Widerstandsmodellen entspricht. Danach gilt

$$K = \text{Cu} \frac{L(\varepsilon)}{18} \frac{d^2}{1 - \varepsilon} \quad (\text{E.1})$$

bei Verwendung des Schlupfkorrekturfaktors Cu aus Gleichung (5.6).

Bei diesem Modell ist es a priori zulässig, die Deckschicht entweder als Schüttung von Agglomeraten oder aber als Schüttung von Primärpartikeln zu betrachten (wie *Konstandopoulos et al.* in [83]). Im letzteren Fall geht in Gleichung (E.1) der Primärpartikeldurchmesser und die tatsächliche Porosität der Rußschicht ein, im ersteren Fall der Mobilitätsdurchmesser der Agglomerate und der im Folgenden als *effektive Porosität* ε_{eff} bezeichnete Hohlvolumenanteil in einer Schüttung aus Partikeln der Dichte ρ_{agg} aus Gleichung (3.5). Die effektive Porosität steht nach

$$\varepsilon_{\text{eff}} = 1 - \frac{\rho_P}{\rho_{\text{agg}}} (1 - \varepsilon) \quad (\text{E.2})$$

mit der tatsächlichen Porosität und den Dichten von Agglomerat und Primärpartikel im Zusammenhang.

Die Schüttdichte ρ_S lässt sich in Abhängigkeit von Porosität oder effektiver Porosität ausdrücken:

$$\rho_S = (1 - \varepsilon) \rho_P = (1 - \varepsilon_{\text{eff}}) \rho_{\text{agg}}. \quad (\text{E.3})$$

Für den Strömungswiderstand $(\rho_S K)_{\text{Ru}\beta}$ ergibt sich aus Gleichung (E.1) und Gleichung (E.3) für eine Schüttung aus Primärpartikeln

$$(\rho_S K)_{\text{Ru}\beta} = \text{Cu}_p \frac{L(\varepsilon) \rho_P d_p^2}{18} \quad (\text{E.4})$$

und für eine Schüttung aus Agglomeraten

$$(\rho_S K)_{\text{Ru}\beta} = \text{Cu}_m \frac{L(\varepsilon_{\text{eff}}) \rho_{\text{agg}} d_m^2}{18}. \quad (\text{E.5})$$

Auf der Basis der experimentellen Untersuchung des Strömungswiderstands der Rußschicht wurde bewertet, ob durch diesen Ansatz die Abhängigkeit vom Durchmesser der Rußpartikel wiedergegeben wird und welcher Partikeldurchmesser charakteristisch für den Strömungswiderstand ist.

E.2 Experimentelle Untersuchungen

E.2.1 Experimenteller Aufbau und Durchführung der Experimente

Proben des Sintermetall-Filtermediums wurden im Labor bei konstanter Filtrationsgeschwindigkeit mit Ruß unterschiedlichen mittleren Agglomeratdurchmessers beladen. Zur Erzeugung von Ruß wurde der *CAST*-Rußgenerator verwendet. Eine Beschreibung der Agglomerateigenschaften und ein Vergleich zu Diesel-Ruß ist in Anhang C aufgeführt.

Die Beladung der Proben wurde in der in Abschnitt 4.2.1 beschriebenen und in Abbildung 4.2 dargestellten Vorrichtung durchgeführt. Während der Beladung wurde der Differenzdruck über die Vorrichtung mit einem Differenzdrucksensor (*Druck, Typ LPM 9381*, Messbereich 0-50 mbar, Unsicherheit 0,1% des Messbereichs [36]) gemessen. Durch Wägung des Probenträgers und der Probe vor und nach der Beladung wurde die eingelagerte Rußmenge bestimmt. Unter der Annahme, dass die Rußkonzentration im zugeführten Gas konstant und der Abscheidegrad 100% ist, gilt für die zu jedem Zeitpunkt eingelagerte Rußmenge

$$m''(t) = \frac{m}{A} \frac{\int_0^t \dot{V} dt}{\dot{V}_{\text{gesamt}}}, \quad (\text{E.6})$$

wobei m die insgesamt eingelagerte Rußmasse, \bar{V} der mittlere Gasvolumenstrom und t_{gesamt} die Gesamtdauer der Beladung ist. Durch Messungen mit dem SMPS wurde die zeitliche Konstanz der Rußkonzentration in der Zuströmung nachgewiesen und der Verlauf des Abscheidegrads bestimmt. Die Annahme von vollständiger Abscheidung ist bereits für geringe Beladungen $m'' > 0,01 \text{ g/m}^2$ gerechtfertigt. Da in allen Versuchen eine Flächenbeladung $m'' = 4 \text{ g/m}^2$ überschritten wurde, ist der Fehler bei der Korrelation der Zeit zur eingelagerten Masse gering.

E.2.2 Ergebnisse für variable Filtrationsgeschwindigkeit und variable Partikelgröße

In Abbildung E.1 ist der Verlauf des Strömungswiderstands, ausgedrückt durch den Quotienten aus Differenzdruck Δp und Filtrationsgeschwindigkeit $|\mathbf{v}|$, über der flächenspezifischen Rußbeladung m'' aufgetragen. Bei den exemplarisch dargestellten Versuchen unterschieden sich der mittlere Durchmesser der filtrierte Rußpartikel (massengemittelter Mobilitätsdurchmesser nach Gleichung (C.1) $\bar{d}_{m,0} = 111 \text{ nm}$ bzw. 234 nm) und die Filtrationsgeschwindigkeit ($|\mathbf{v}| \approx 1 \text{ cm/s}$, 2 cm/s bzw. 3 cm/s). Wie zu sehen ist, nimmt sowohl der Strömungswiderstand, der bei geringer Rußbeladung durch *Clogging* verursacht wird, als auch die Steigung des Verlaufs in der Phase der Deckschichtfiltration mit zunehmender Filtrationsgeschwindigkeit und mit abnehmender Partikelgröße zu.

Aus der Steigung im Bereich der Deckschichtfiltration wurde der Strömungswiderstand der Rußschicht, entsprechend Gleichung (3.19) charakterisiert durch das Produkt aus Schüttdichte und Permeabilität, durch Differentiation nach der Rußmasse bestimmt:

$$(\rho_S K)_{\text{Ru}\beta} = \left(\frac{d(\Delta p / \mu |\mathbf{v}|)}{dm''} \right)^{-1}. \quad (\text{E.7})$$

$(\rho_S K)_{\text{Ru}\beta}$ ist in Abbildung E.2 für verschiedene Mobilitätsdurchmesser $\bar{d}_{m,0}$ und unterschiedliche Filtrationsgeschwindigkeiten dargestellt. Für niedrige Filtrationsgeschwindigkeiten ist der Einfluss auf den Strömungswiderstand deutlich ausgeprägt und nimmt zu höherer Filtrationsgeschwindigkeit hin ab. Es ist davon auszugehen, dass bei niedriger Filtrationsgeschwindigkeit Rußschichten höherer Porosität entstehen. Die Porosität der Rußschicht war jedoch in den durchgeführten Experimenten nicht mit ausreichender Genauigkeit messtechnisch zugänglich.

Durch Vergleich des Strömungswiderstands $(\rho_S K)_{\text{Ru}\beta}$ mit Gleichung (E.4) bzw. Gleichung (E.5) des Strömungswiderstandsmodells wurde der Korrekturfaktor L , durch welchen die Abhängigkeit von der Porosität wieder gegeben wird, für

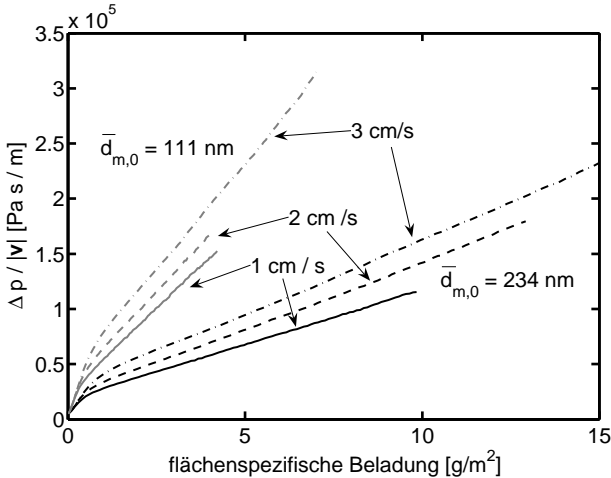


Abbildung E.1: Exemplarische Verläufe des Strömungswiderstands über der flächenspezifischen Rußbeladung für *CAST*-Ruß verschiedener mittlerer Partikelgröße bei Variation der Filtrationsgeschwindigkeit

jede Messung bestimmt. In Abbildung E.3 links sind die Werte bei Betrachtung der Rußschicht als Schüttung von Primärpartikeln mit dem Primärpartikeldurchmesser aus Tabelle C.1, rechts die Werte bei Betrachtung als Schüttung von Kugeln des Durchmessers $\bar{d}_{m,0}$ und der Dichte ρ_{agg} dargestellt.

Der Korrekturfaktor L unterscheidet sich bei der Betrachtung als Schüttung aus Agglomeraten nicht für die unterschiedlichen Rußsorten. Für Rußschichten, die bei niedriger Filtrationsgeschwindigkeit erzeugt wurden, ist bei Verwendung des Primärpartikeldurchmessers der Korrekturfaktor $L > 1$, d. h. die Widerstandskraft, die ein einzelnes Partikel im Mittel auf die Strömung ausübt ist geringer als die *Stokes*-Kraft. Ein solches Verhalten ist mit Abschattungseffekten in den kettigen Anordnungen der Primärpartikel in den Dendriten der Rußagglomerate erklärbar. Die Werte für L bei Verwendung des Mobilitätsdurchmessers decken sich mit Werten, welche von den in Anhang D diskutierten Permeabilitätsmodellen für Schüttungen mit einer Porosität $\varepsilon > 90\%$ vorhergesagt werden. Unter Verwendung des Modells von *Happel* [47] nach Gleichung (D.13) berechnete Porositäten sind in Abbildung E.4 dargestellt.

Eine messtechnische Bestimmung der Porosität der in den Versuchen erzeugten Rußschicht war nicht mit ausreichender Genauigkeit möglich. Mit Werten

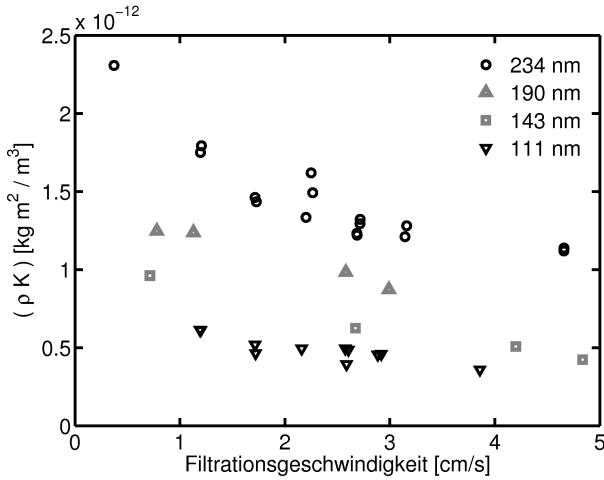


Abbildung E.2: Strömungswiderstand der Rußschicht bei Variation von Anströmung und Partikelgröße

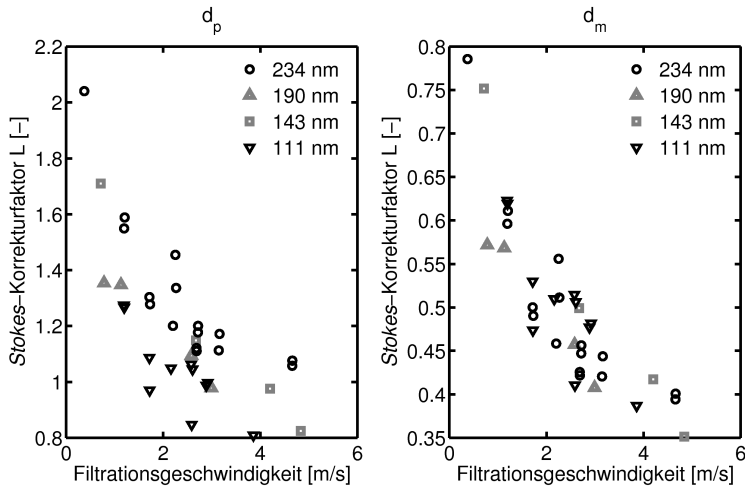


Abbildung E.3: Korrekturfaktoren gegenüber der *Stokes*-Permeabilität links bei Betrachtung der Rußschicht als Schüttung aus Primärpartikeln nach Gleichung (E.4), rechts als Schüttung aus Agglomeraten nach Gleichung (E.5)

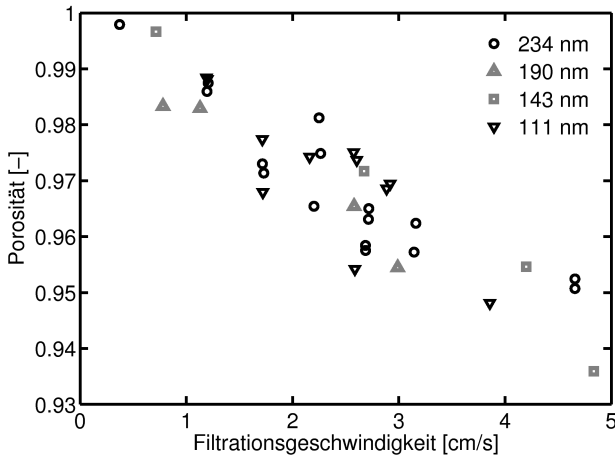


Abbildung E.4: Porosität der Rußschicht, aus dem *Stokes*-Korrekturfaktor aus Abbildung E.3 rechts mit dem *Happel*-Modell berechnet

zwischen 93% und 99,8% ist die aus dem Strömungswiderstand berechnete Porosität der Rußschicht in Abbildung E.4 jedoch in einem plausiblen Bereich. Bei der Betrachtung der Rußschicht als Schüttung aus Primärpartikeln lässt sich nicht auf sinnvolle Werte der Porosität zurück rechnen.

Daraus kann geschlossen werden, dass der massengemittelte Mobilitätsdurchmesser der Rußagglomerate für den Strömungswiderstand der Rußschicht ein charakteristisches Größenmaß darstellt. Ein abschließender experimenteller Nachweis durch Messung der Porosität der Rußschicht und Nachweis der Unabhängigkeit der effektiven Porosität vom Agglomeratdurchmesser stehen jedoch noch aus.

E.2.3 Ergebnisse für variable Temperatur

Ein weiterer Hinweis darauf, welches Größenmaß charakteristisch für den Strömungswiderstand der Rußpartikel ist, kann aus der Abhängigkeit der Permeabilität von der Temperatur abgeleitet werden. Durch Messung des Differenzdrucks über den Versuchsreaktor während der in Abbildung 4.11 dargestellten Temperaturrampenversuche wurde diese Abhängigkeit experimentell untersucht. Der Dif-

ferenzdruck wird dominiert durch den Differenzdruck der Rußschicht (siehe Gleichung (3.19)) mit

$$\Delta p = \frac{\mu m'' \dot{m}_{\text{Gas}}''}{\rho_{\text{Gas}} (\rho_{\text{S}} K)_{\text{Ruß}}} . \quad (\text{E.8})$$

Das Verhältnis des Strömungswiderstands der Rußschicht bei der Temperatur T zum Strömungswiderstand der identischen Rußschicht bei der Bezugstemperatur T_0 ist dann

$$\frac{\rho_{\text{S}} K(T)}{\rho_{\text{S}} K(T_0)} = \frac{\mu(T) \rho_{\text{Gas}}(T_0) \Delta p(T_0)}{\mu(T_0) \rho_{\text{Gas}}(T) \Delta p(T)} = \frac{C_u}{C_{u0}} \quad (\text{E.9})$$

und entspricht dem Verhältnis der Schlupf-Korrekturfaktoren. Abbildung E.5 zeigt die so normierte Permeabilität der Rußschicht in den drei Temperaturrampenversuchen aufgetragen über der stromauf der Filterprobe gemessenen Temperatur. Bis zum Einsetzen des Abbrands bei Temperaturen oberhalb von 500 °C steigt die normierte Permeabilität auf etwa das 2,5-fache des ursprünglichen Wertes an.

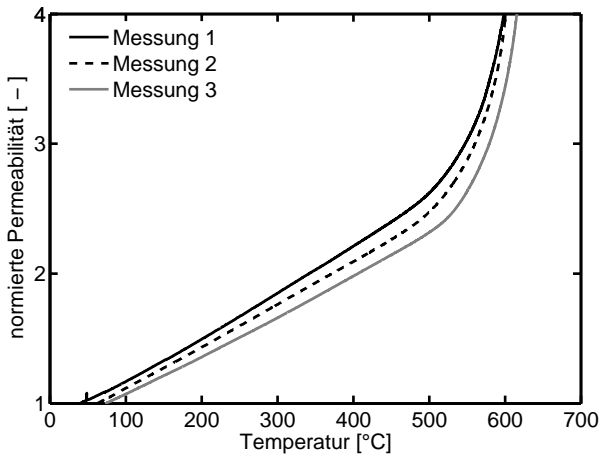


Abbildung E.5: Änderung der normierten Permeabilität der Rußschicht nach Gleichung (E.9) in drei Aufheizversuchen

Aus diesen Ergebnissen lässt sich, wie im Folgenden gezeigt wird, auf die für den Strömungswiderstand charakteristische Abmessung schließen. Differentiation von Gleichung (E.9) nach der Temperatur liefert mit

$$(\rho_S K)_T := \frac{1}{\rho_S K(T_0)} \frac{\partial(\rho_S K(T))}{\partial T} = \frac{1}{Cu_0} \frac{\partial Cu}{\partial T} \quad (\text{E.10})$$

die Steigung der Verläufe in Abbildung E.5. Für den Schlupfkorrekturfaktor Cu gilt nach Gleichung (5.6) mit der mittleren freien Weglänge aus Gleichung (5.8):

$$Cu = 1 + \frac{2Ak_B T}{\sqrt{2}\pi p \sigma^2 d} =: 1 + \frac{A'T}{d}. \quad (\text{E.11})$$

Wird die *Knudsen*-Abhängigkeit von A nach *Sorensen und Weber* [141] vernachlässigt, so ist A' konstant¹. Differentiation nach der Temperatur und Einsetzen in Gleichung (E.10) ergibt:

$$(\rho_S K)_T = \frac{A'/d}{1 + T_0 A'/d} \quad (\text{E.12})$$

und schließlich den Zusammenhang

$$d = A' ((\rho_S K)_T^{-1} - T_0) \quad (\text{E.13})$$

zur Bestimmung der charakteristischen Partikelgröße aus der Temperaturabhängigkeit des Strömungswiderstands der Rußschicht.

Wird aus den Steigungen der Verläufe in Abbildung E.5 die charakteristische Partikelgrößen nach Gleichung (E.13) berechnet, so ergeben sich für die dargestellten Messungen Werte von 207 nm, 202 nm und 239 nm. Diese Ergebnisse unterstützen die Schlussfolgerung, dass der massengemittelte Mobilitätsdurchmesser, der für den verwendeten *CAST*-Ruß dieses Betriebspunkts zu 234 nm bestimmt wurde (siehe Anhang C), charakteristisch für den Strömungswiderstand der Rußschicht ist.

¹Verwendung eines konstanten Werts von $A = 1,612$ in Gleichung (5.6) führt nach *Sorensen und Weber* [141] zu einem maximalen Fehler von 10% bei $Kn \approx 0,5$ und wesentlich geringeren Abweichungen für größere und kleinere *Knudsen*-Zahlen.

Literaturverzeichnis

- [1] ABTHOFF, J.; SCHUSTER, H.; LANGER, H.; LOOSE, G.: The regenerable trap oxidizer - An emission control technique for diesel engines. In: *SAE Paper* (1985), Nr. 850015
- [2] AHLSTRÖM, A. F.; ODENBRAND, C. U. I.: Combustion characteristics of soot deposits from diesel engines. In: *Carbon* 27 (1989), Nr. 3
- [3] AHMED, S.; BACK, M. H.; ROSCOE, J. M.: A kinetic model for the low temperature oxidation of carbon: I. In: *Combustion and Flame* 70 (1987)
- [4] ALLEN, M. D.; RAABE, O. G.: Slip correction measurements of spherical solid aerosol particles in an improved Millikan apparatus. In: *Aerosol Science and Technology* 4 (1985)
- [5] ANDERSEN, P. S.; KAYS, W. M.; MOFFAT, R. J.: Zero pressure gradient constant injection. In: BRADSHAW, P. (Hrsg.); LAUNDER, B. E. (Hrsg.); LUMLEY, J. L. (Hrsg.): *Collaborative Testing of Turbulence Models - Data Library*. – Case 0241. <http://scholar.lib.vt.edu/ejournals/JFE/data/JFE/DB96-243/d1/f0241>. – Online-Ressource, Abruf: 11.07.2005
- [6] ANDERSEN, P. S.; KAYS, W. M.; MOFFAT, R. J.: Experimental results for the transpired turbulent boundary layer in an adverse pressure gradient. In: *Journal of Fluid Mechanics* 69 Teil 2 (1975)
- [7] ANSYS INC.: *ANSYS ICEM CFD 5.1 User Manual*. 2004
- [8] BACK, M. H.: The kinetics of the reaction of carbon with oxygen. In: *Canadian Journal of Chemistry* (1997), Nr. 75
- [9] BAERNS, M.; HOFMANN, H.; RENKEN, A.: *Chemische Reaktionstechnik*. Stuttgart : Georg Thieme Verlag, 1992 (Lehrbuch der technischen Chemie, Band 1)
- [10] BAUM, M. M.; STREET, P. J.: Predicting the combustion behaviour of coal particles. In: *Combustion Science and Technology* 3 (1971)

- [11] BAUSEWEIN, S.: *Ermittlung der Rußabbrandkinetik an Sintermetallproben in einem Differentialreaktor*, Universität Stuttgart, Diplomarbeit Nr. E 66, 2003
- [12] BECHMANN, O.; CARLI, S.; ENGELER, W.; GARBE, T.; LACH, G.; RYAN, L.; SCHINDLER, K.-P.: Partikelemission und -messung aus Sicht des Anwenders: heute und morgen. In: *23. Internationales Wiener Motorensymposium*, 2002
- [13] BECKER, C.; REINSCH, B.; STROBEL, M.; FRISSE, H.: Cordierit und fortschrittliches Regenerationsmanagement: Der Bosch Ansatz für eine neue DPF-System Generation. In: *16. Aachener Kolloquium Fahrzeug- und Motorentechnik*. Aachen, 2007
- [14] BEWS, I. M.; HAYHURST, A. N.; RICHARDSON, S. M.; TAYLOR, S. G.: The order, Arrhenius parameters, and mechanism of the reaction between gaseous oxygen and solid carbon. In: *Combustion and Flame* 124 (2001)
- [15] BHATIA, S. K.; PERLMUTTER, D. D.: A population balance approach to the modeling of solid phase reactions. In: *AIChE Journal* 25 (1979)
- [16] BHATIA, S. K.; PERLMUTTER, D. D.: A random pore model for fluid-solid reactions: I. isothermal, kinetic control. In: *AIChE Journal* 26 (1980), Nr. 3
- [17] BIRD, R. B.; STEWART, W. A.; LIGHTFOOT, E. N.: *Transport phenomena*. New York : John Wiley & Sons, 1960
- [18] BISSETT, E. J.: Mathematical model of the thermal regeneration of a wall-flow monolith diesel particulate filter. In: *Chemical Engineering Science* 39 (1984), Nr. 7/8
- [19] BISSETT, E. J.; SHADMAN, F.: Thermal regeneration of diesel-particulate monolithic filters. In: *AIChE Journal* 31 (1985), Nr. 5
- [20] BLANCHARD, G.; SEGUELONG, T.; MICHELIN, J.; SCHUERHOLZ, S.; TERRES, F.: Ceria-based fuel-borne catalysts for series diesel particulate filter regeneration. In: *SAE Paper* (2003), Nr. 2003-01-0378
- [21] BOCKHORN, H.: *Soot Formation in Combustion: Mechanisms and Models*. Berlin : Springer-Verlag, 1994 (Springer Series in Chemical Physics)
- [22] BRILHAC, J. F.; BENSOUDA, F.; GILOT, P.; BRILLARD, A.; STANMORE, B.: Experimental and theoretical study of oxygen diffusion within packed beds of carbon black. In: *Carbon* (2000), Nr. 38

-
- [23] BURTSCHER, H.: Physical properties of particulate emissions from diesel engines: a review. In: *Journal of Aerosol Science* 36 (2005)
- [24] CARMAN, P. C.: The determination of the specific surface of powders I. In: *Journal of the Society of Chemical Industry / Transactions and Communications* 57 (1937)
- [25] CHEN, H. C.; PATEL, V. C.: Near-wall turbulence models for complex flows including separation. In: *AIAA Journal* 26 (1988), Nr. 6
- [26] CIAMBELLI, P.; CORBO, P.; GAMBINO, M.; PALMA, V.; VACCARO, S.: Catalytic combustion of carbon particulate. In: *Catalysis Today* (1996), Nr. 27
- [27] COOPER, J.; HALLETT, W. L. H.: A numerical model for packed-bed combustion of char particles. In: *Chemical Engineering Science* (2000), Nr. 55
- [28] CROWE, C. C.; SOMMERFELD, M.; TSUJI, Y.: *Multiphase flows with droplets and particles*. Boca Raton : CRC press, 1998
- [29] DANKERS, S.; SCHRAML, S.; WILL, S.; LEIPERTZ, A.: Erprobung der laserinduzierten Glühetechnik zur Bestimmung der Primärpartikelgrößen von Nanoteilchen am Beispiel von Industrierußen. In: *Chemie Ingenieur Technik* 1-2 (2002)
- [30] DAVIES, C. N.: The separation of airborne dust and particles. In: *Proc. Inst. Mech. Engrs. Part B1* (1952)
- [31] DECARLO, P. F.; SLOWIK, J. G.; WORSNOP, D. R.; DAVIDOVITS, P.; JIMENEZ, J. L.: Particle morphology and density characterization by combined mobility and aerodynamic diameter measurements. Part 1: Theory. In: *Journal of Aerosol Science* 38 (2004)
- [32] DEUSCHLE, T.; HITZLER, G.; JANOSKE, U.; WEIK, W.: *Langzeitstabilität von Partikelfiltern in Dieselmotoren*. Abschlussbericht, FVV Heft 805, 2005
- [33] DEUSCHLE, T.; JANOSKE, U.; PIESCHE, M.: Numerical simulation of the filtration and regeneration in diesel particulate traps. In: *World Filtration Congress 9 Conference Proceedings*. New Orleans, 2004
- [34] DI FELICE, R.: The voidage function for fluid-particle interaction systems. In: *International Journal of Multiphase Flow* 20 (1994), Nr. 1

- [35] DREHER, W.; HARSCHER, A.; NISCH, W.; BURKHARDT, C.: TEM-Analysis of diesel engine particle emission to get a correlation of the geometric parameters with the SMPS mobility diameter. In: *6th International ETH-Conference on Nanoparticle Measurement*, 2002
- [36] DRUCK LTD.: *LP9000 Series - low differential pressure sensors*. <http://www.druck.com/de/products/lpxm9000.pdf>. – Online-Ressource, Abruf: 25.04.2005
- [37] DU, Z.; SAROFIM, A. F.; LONGWELL, J. P.; MIMS, C. A.: Kinetic measurements and modeling of carbon oxidation. In: *Energy and Fuels* (1991), Nr. 5
- [38] DULLIEN, F. A. L.: Single phase flow through porous media and pore structure. In: *The Chemical Engineering Journal* 10 (1975)
- [39] EUROPÄISCHES PARLAMENT, EUROPÄISCHER RAT: *Richtlinie 98/69/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 13. Oktober 1998 über Maßnahmen gegen die Verunreinigung der Luft durch Emissionen von Kraftfahrzeugen und zu Änderung der Richtlinie 70/220/EWG des Rates* (1998). <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=CELEX:31998L0069:DE:HTML>. – Online-Ressource, Abruf: 22.01.2008
- [40] EUROPÄISCHES PARLAMENT, EUROPÄISCHER RAT: *Verordnung (EG) Nr. 715/2007 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 20. Juni 2007 über die Typgenehmigung von Kraftfahrzeugen hinsichtlich der Emissionen von leichten Personenkraftwagen und Nutzfahrzeugen (Euro 5 und Euro 6) und über den Zugang zu Reparatur- und Wartungsinformationen für Fahrzeuge (Text von Bedeutung für den EWR)* (2007). <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=CELEX:32007R0715:DE:HTML>. – Online-Ressource, Abruf: 22.01.2008
- [41] Fluent Inc.: *Fluent 6.2 Documentation*. 2005
- [42] FRIEDLANDER, S. K.: *Smoke, dust, and haze - fundamentals of aerosol dynamics*. 2. Ausgabe. New York : Oxford university press, 2000
- [43] GARNER, C. P.; DENT, J. C.: A thermal model for monolithic and fibrous diesel particulate traps. In: *SAE Paper* (1988), Nr. 880007

-
- [44] GNIELINSKI, V.: Wärmeübertragung bei der Strömung durch Rohre. In: VEREIN DEUTSCHER INGENIEURE (Hrsg.): *VDI Wärmeatlas, 8. Auflage*. Berlin : Springer-Verlag, 1997, Kapitel Ga
- [45] GREMYACHKIN, V. M.; RUCKERT, F. U.: Regimes of a porous carbon particle combustion in oxygen. In: *Proceedings of the European Combustion Meeting 2003*
- [46] GUYON, E.; OGER, L.; PLONA, T. J.: Transport properties in sintered porous media composed of two particles sizes. In: *Journal of Physics D: Applied Physics* 20 (1987)
- [47] HAPPEL, J.: Viscous flow in multiparticle systems: slow motion of fluids relative to beds of spherical particles. In: *AIChE Journal* 4 (1958), Nr. 2
- [48] HARALAMPOUS, O. A.; KOLTSAKIS, G. C.: Intra-layer temperature gradients during regeneration of diesel particulate filters. In: *Chemical Engineering Science* 57 (2002)
- [49] HARALAMPOUS, O. A.; KOLTSAKIS, G. C.: Oxygen diffusion modeling in diesel particulate filter regeneration. In: *AIChE Journal* 50 (2004), Nr. 9
- [50] HARRIS, S. J.; MARICQ, M. M.: Signature size distributions for diesel and gasoline engine exhaust particulate matter. In: *Journal of Aerosol Science* 32 (2001)
- [51] HARRIS, S. J.; MARICQ, M. M.: The role of fragmentation in defining the signature size distribution of diesel soot. In: *Journal of Aerosol Science* 33 (2002)
- [52] HEINRICH, J.; SCHWARZE, P. E.; STILIANAKIS, N.; MOMAS, I.; MEDINA, S.; TOTLANDSDAL, A. I.; VON BREE, L.; KUNA-DIBBERT, B.; KRZYZANOWSKI, M.: Studies on health effects of transport-related air pollution (2005). <http://www.euro.who.int/document/e86650.pdf>. In: KRZYZANOWSKI, M. (Hrsg.): *Health effects of transport-related air pollution*. World Health Organization
- [53] HÖFFKEN, T.; MICHAELIS, B.: CFD simulation of the Bosch diesel particulate filter. In: SEIBERT, K. W. (Hrsg.); HANNA, R. K. (Hrsg.): *Proceedings of the 2nd European Automotive CFD Conference*. Frankfurt am Main, 2005

- [54] HO, F. G.; STRIEDER, W.: Numerical evaluation of the porous medium effective diffusivity between the Knudsen and continuum limits. In: *Journal of Computational Physics* 73 (1980), Nr. 12
- [55] HOFFMANN, U.; RIECKMANN, T.; MA, J.: Kinetic study and modelling of diesel particulate filter regeneration. In: *Chemical Engineering Science* 46 (1991), Nr. 4
- [56] HONEYWELL INTERNATIONAL INC.: *Configurable Differential Pressure Transducers FP2000 Series*. <http://www.sensotec.com/pdf/fpdiff.pdf>. Produktdatenblatt 2005. – Online-Ressource, Abruf: 11.04.2005
- [57] HONG, J.: *Modeling char oxidation as a function of pressure using an intrinsic langmuir rate equation*, Brigham Young University, Dissertation, 2000
- [58] HURT, R. H.; CALO, J. M.: Semi-global intrinsic kinetics for char combustion modeling. In: *Combustion and Flame* (2001), Nr. 125
- [59] ISHIGURO, T.; TAKATORI, Y.; AKIHAMA, K.: Microstructure of diesel soot particles probed by electron microscopy: first observation of inner core and outer shell. In: *Combustion and Flame* 108 (1997)
- [60] JING, L.: Neuer Russgenerator für Verbrennungsrussteilchen zur Kalibrierung von Partikelmessgeräten. In: *OFMET Info* 7 (2000), Nr. 2
- [61] JING, L.: Properties of soot particles produced by a combustion aerosol standard. In: *4th ETH Conference on nanoparticle measurement*. Zürich, 2000
- [62] JING, L.: Influence of Air on the Soot Particles in Co-Flow Diffusion Flame. In: *6th ETH Conference on nanoparticle measurement*. Zürich, 2002
- [63] JING, L.: *Jing-CAST burner operating handbook*. 2004
- [64] JING, L.: *Persönliche Korrespondenz*. Stuttgart, Juni 2004
- [65] JULIEN, H. L.; KAYS, W. M.; MOFFAT, R. J.: Experimental hydrodynamics of the accelerated turbulent boundary layer with and without mass injection. In: *Journal of Heat Transfer* (1971)
- [66] KARLUVALI, A.: *Measurement of soot oxidation rate on sintered metal filter and assessment of soot oxidation models*, Universität Stuttgart, WASTE Program Master Thesis Nr. E 70, 2004

-
- [67] KAVIANY, M.: *Principles of heat transfer in porous media*. Berlin : Springer-Verlag, 1995
- [68] KIM, A. S.; YUAN, R.: Hydrodynamics of an ideal aggregate with quadratically increasing permeability. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 285 (2005)
- [69] KITTELSON, D. B.: Engines and nanoparticles: a review. In: *Journal of Aerosol Science* 29 (1998), Nr. 5/6
- [70] KOLL, J.; FRISSE, H.; NEUMANN, P.; JUTKA, C.; CLAUS, J.: *Exhaust gas particulate filter made of sintered metal*. Patent WO 02/102492 A1, 2002
- [71] KOLTSAKIS, G. C.; STAMATELOS, A. M.: Modeling thermal regeneration of wall-flow diesel particulate traps. In: *AIChE Journal* 42 (1996), Nr. 6
- [72] KOLTSAKIS, G. C.; STAMATELOS, A. M.: Modeling catalytic regeneration of wall-flow particulate filters. In: *Ind. Eng. Chem. Res.* (1996), Nr. 35
- [73] KOLTSAKIS, G. C.; STAMATELOS, A. M.: Modes of catalytic regeneration in diesel particulate regeneration in diesel filters. In: *Ind. Eng. Chem. Res.* (1997), Nr. 36
- [74] KONSTANDOPOULOS, A. G.; BOUDOURIS, D.; BALZPOULOU, P. K.; PAPAIOANNOU, E.: Estimation of effective density and fractal-like dimension of soot particles. In: *8th ETH Conference on combustion generated particles*. Zürich, 2004
- [75] KONSTANDOPOULOS, A. G.: Flow resistance descriptors for diesel particulate filters: definitions, measurements and testing. In: *SAE Paper* (2003), Nr. 2003-01-0846
- [76] KONSTANDOPOULOS, A. G.; JOHNSON, J. H.: Wall-flow diesel particulate filters - their pressure drop and collection efficiency. In: *SAE Paper* (1989), Nr. 890405
- [77] KONSTANDOPOULOS, A. G.; KOSTOGLU, M.: Periodically reversed flow regeneration of diesel particulate traps. In: *SAE Paper* (1999), Nr. 1999-01-0469
- [78] KONSTANDOPOULOS, A. G.; KOSTOGLU, M.: Reciprocating flow regeneration of soot filters. In: *Combustion and Flame* (2000), Nr. 121

- [79] KONSTANDOPOULOS, A. G.; KOSTOGLU, M.: Microstructural aspects of soot oxidation in diesel particulate filters. In: *SAE Paper* (2004), Nr. 2004-01-0693
- [80] KONSTANDOPOULOS, A. G.; KOSTOGLU, M.; HOUSIADA, P.: Spatial non-uniformities in diesel particulate trap regeneration. In: *SAE Paper* (2001), Nr. 2001-01-0908
- [81] KONSTANDOPOULOS, A. G.; KOSTOGLU, M.; HOUSIADA, P.; VLACHOS, N.; ZARVALIS, D.: Multichannel simulation of soot oxidation in diesel particulate filters. In: *SAE Paper* (2003), Nr. 2003-01-0839
- [82] KONSTANDOPOULOS, A. G.; KOSTOGLU, M.; SKAPERDAS, E.; PAPAIOANNOU, E.; ZARVALIS, D.; KLADOPOULOU, E.: Fundamental studies of diesel particulate filters: transient loading, regeneration and aging. In: *SAE Paper* (2000), Nr. 2000-01-1016
- [83] KONSTANDOPOULOS, A. G.; KOSTOGLU, M.; VLACHOS, N.; KLADOPOULOU, E.: Progress in diesel particulate filter simulation. In: *SAE Paper* (2005), Nr. 2005-01-0946
- [84] KONSTANDOPOULOS, A. G.; SKAPERDAS, E.; MASOUDI, M.: Inertial contributions to the pressure drop of diesel particulate filters. In: *SAE Paper* (2001), Nr. 2001-01-0909
- [85] KONSTANDOPOULOS, A. G.; SKAPERDAS, E.; MASOUDI, M.: Microstructural properties of soot deposits in diesel particulate traps. In: *SAE Paper* (2002), Nr. 2002-01-1015
- [86] KONSTANDOPOULOS, A. G.; VLACHOS, N.; HOUSIADA, P.; KOSTOGLU, M.: Simulation of triangular-cell-shaped, fibrous wall-flow filters. In: *SAE Paper* (2003), Nr. 2003-01-0844
- [87] KUWABARA, S.: The forces experienced by randomly distributed parallel circular cylinders or spheres in a viscous flow at small Reynolds numbers. In: *Journal of the Physical Society of Japan* 14 (1959), Nr. 4
- [88] KYAN, C. P.; WASAN, D. T.; KINTNER, R. C.: Flow of single-phase fluids through fibrous beds. In: *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 9 (1970), Nr. 4

-
- [89] KÖYLÜ, U.; XING, Y.; ROSNER, D. E.: Fractal morphology analysis of combustion-generated aggregates using angular light scattering and electron microscope images. In: *Langmuir* 11 (1995)
- [90] LADOMMATOS, N.; RUBENSTEIN, P.; HARRISON, K.; XIAO, Z.; ZHAO, H.: The effect of aromatic hydrocarbons on soot formation in laminar diffusion flames and in a diesel engine. In: *Journal of the Institute of Energy* 70 (1997)
- [91] LADOMMATOS, N.; SONG, H.; ZHAO, H.: Measurements and predictions of diesel soot oxidation rates. In: *Proc. Instn. Mech. Engrs. Vol. 216, Part D: J. Automobile Engineering* (2002)
- [92] LARSON, R. E.; HIGDON, J. J. L.: A periodic grain consolidation model of porous media. In: *Phys. Fluids A* 1 (1989), Nr. 1
- [93] LAURENDEAU, N. M.: Heterogeneous kinetics of coal char gasification and combustion. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 4 (1978)
- [94] LEIPERTZ, A.; SOMMER, R.; SCHULTE, L.-E.: Systemerprobung und experimentelle Untersuchungen. In: *ABEME-Abgasmeßverfahren zur Bewertung von Fahrzeugen mit Minimalemissionen - Abschlußbericht* BMBF Projekt 19 U 0053, 2003
- [95] LIZZIO, A. A.; JIANG, H.; RADOVIĆ, L. R.: On the kinetics of carbon (char) gasification: reconciling models with experiments. In: *Carbon* 28 (1990), Nr. 1
- [96] MA, J.: *Reaktionstechnische Untersuchungen zur Regenerierung von Dieseleruß*, Universität Clausthal, Dissertation, 1989
- [97] MACDONALD, I. F.; EL-SAYED, M. S.; MOW, K.; DULLIEN, F. A. L.: Flow through porous media - the Ergun equation revisited. In: *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 18 (1979), Nr. 3
- [98] MEGARIDIS, C. M.; DOBBINS, R. A.: Morphological description of flame-generated materials. In: *Combustion Science and Technology* 71 (1990)
- [99] MENTER, F.: *Persönliche Mitteilung*. Otterfing, Februar 2005
- [100] MERKEL, G. A.; BEALL, D. M.; HICKMAN, D. L.; VERNACOTOLA, M. J.: Effects of microstructure and cell geometry on performance of cordierite diesel particulate filters. In: *SAE Paper* (2001), Nr. 2001-01-0193

- [101] MERKEL, G. A.; CUTLER, W. A.; WARREN, C. J.: Thermal durability of wall-flow ceramic diesel particulate filters. In: *SAE Paper* (2001), Nr. 2001-01-0190
- [102] MIESSEN, G.: *Simulation der Koksverbrennung unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen*, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Dissertation, 2000
- [103] MIYAIRI, Y.; MIWA, S.; ABE, F.; XU, Z.; NAKASUJI, Y.: Numerical study on forced regeneration of wall-flow diesel particulate filters. In: *SAE Paper* (2001), Nr. 2001-01-0912
- [104] MOFFAT, R. J.; KAYS, W. M.: The turbulent boundary layer on a porous plate: Experimental heat transfer with uniform blowing and suction. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 11 (1968)
- [105] MOLERUS, O.; PAHL, M. H.; RUMPF, H.: Die Porositätsfunktion in empirischen Gleichungen für den Durchströmungswiderstand im Bereich $Re \leq 1$. In: *Chemie Ingenieur Technik* 43 (1971), Nr. 6
- [106] NEALE, G. H.; NADER, W. K.: Prediction of transport processes within porous media: Creeping flow relative to a fixed swarm of spherical particles. In: *AIChE Journal* 20 (1974), Nr. 3
- [107] NEEFT, J. P. A.: *Catalytic oxidation of soot*, Technische Universiteit Delft, Dissertation, 1995
- [108] NEEFT, J. P. A.; NIJHUIS, T. X.; SMAKMAN, E.; MAKKEE, M.; MOULIJN, J. A.: Kinetics of the oxidation of diesel soot. In: *Fuel* 76 (1997), Nr. 12
- [109] OPRIS, C. N.: *A computational model based on the flow, filtration, heat transfer and reaction kinetics theory in a porous ceramic diesel particulate trap*, Michigan Technological University, Dissertation, 1997
- [110] PARK, D. S.; KIM, J. U.; KIM, E.: A burner type trap for particulate matter from a diesel engine. In: *Combustion and Flame* 114 (1998)
- [111] PARK, K.; CAO, F.; KITTELSON, D. B.; MCMURRY, P. H.: Relationship between particle mass and mobility for diesel exhaust particles. In: *Environmental Science and Technology* 37 (2003)

-
- [112] PARK, K.; KITTELSON, D. B.; McMURRY, P. H.: Structural properties of diesel exhaust particles measured by transmission electron microscopy (TEM): Relationships to particle mass and mobility. In: *Aerosol Science and Technology* 38 (2004)
- [113] PAULI, E.; LEPPERHOFF, G.; PISCHINGER, F.: The calculation of regeneration limits of diesel particulate traps for different regeneration methods. In: *SAE Paper* (1984), Nr. 840075
- [114] PECK, R.: *Experimentelle Untersuchung und dynamische Simulation von Oxidationskatalysatoren und Diesel-Partikelfiltern*, Universität Stuttgart, Dissertation, 2006
- [115] PECK, R.; BECKER, C.; WIRTH, R.; EIGENBERGER, G.: Experimentelle Untersuchung und Simulation der Kinetik des Rußabbrandes mit NO_x im Diesel-Partikelfilter. In: *Chemie Ingenieur Technik* 76 (2004), Nr. 9
- [116] PIESCHE, M.: *Mehrphasenströmungen*. Vorlesungsumdruck Universität Stuttgart, 2002
- [117] PISCHINGER, S.: *Verbrennungsmotoren, Band II*. Vorlesungsumdruck RWTH Aachen, 2001
- [118] PONTIKAKIS, G. N.: *Modeling, reaction schemes and kinetic parameter estimation in automotive catalytic converters and diesel particulate filters*, Aristotle University Thessaloniki, Dissertation, 2003
- [119] PONTIKAKIS, G. N.; STAMATELOS, A. M.; BAKASIS, K.; ARAVAS, N.: 3-D catalytic regeneration and stress modeling of diesel particulate filters by ABAQUS FEM software. In: *SAE Paper* (2002), Nr. 2002-01-1017
- [120] RADOVIĆ, L. R.; JIANG, H.; LIZZIO, A. A.: A transient kinetics study of char gasification in carbon dioxide and oxygen. In: *Energy and Fuels* 5 (1991)
- [121] RADOVIĆ, L. R.; WALKER, P. L.; JENKINS, R. G.: Importance of carbon active sites in the gasification of coal chars. In: *Fuel* 62 (1983)
- [122] RAFFEL, M.; WILLERT, C.; WERELEY, S.; KOMPENHANS, J.: *Particle Image Velocimetry - A Practical Guide*. 2. Auflage. Berlin : Springer-Verlag, 2007

- [123] RAT DER EUROPÄISCHEN GEMEINSCHAFTEN: *Richtlinie 88/436/EWG des Rates zur Änderung der Richtlinie 70/220/EWG zur Angleichung der Rechtsvorschriften der Mitgliedstaaten über Maßnahmen gegen die Verunreinigung der Luft durch Abgase von Kraftfahrzeugmotoren* (1988). <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=CELEX:31988L0436:DE:HTML>. – Online-Ressource, Abruf: 22.01.2008
- [124] RAWLINGS, J. B.; EKERDT, J. G.: *Chemical reactor analysis and design fundamentals - chapter 7: fixed-bed catalytic reactors* (2002). <http://jbrwww.che.wisc.edu/~jbraw/chemreacfun/ch7/slides-masswrxn.pdf>. – Online-Ressource, Abruf: 02.06.2005
- [125] REYES, S.; JENSEN, K. F.: Percolation concepts in modeling of gas-solid reactions - I. Application to char gasification in the kinetic regime. In: *Chemical Engineering Science* 41 (1986), Nr. 2
- [126] ROBERT BOSCH GMBH (Hrsg.): *Abgastechnik für Dieselmotoren*. Gelbe Reihe zur Kraftfahrzeugtechnik, 2004
- [127] RUMPF, H.; GUPTE, A. R.: Einflüsse der Porosität und Korngrößenverteilung im Widerstandsgesetz der Porenströmung. In: *Chemie Ingenieur Technik* 43 (1971), Nr. 6
- [128] SALVAT, O.; MAREZ, P.; BELOT, G.: Passenger car serial application of a particulate filter system on a common rail direct injection diesel engine. In: *SAE Paper* (2000), Nr. 2000-01-0473
- [129] SAMSON, R. J.; MULHOLLAND, G. W.; GENTRY, J. W.: Structural analysis of soot agglomerates. In: *Langmuir* 3 (1987)
- [130] SAVELA, K.; POHJOLA, S.: Polycyclic aromatic hydrocarbons derived from vehicle air pollutants in work environment and exposure to bronchus epithelial cell line (BEAS- 2B). In: *7th ETH-Conference on Combustion Generated Nanoparticles*. Zürich, 2003
- [131] SCHMIDT, I.; KRAFT, T.; RIEDEL, H.; BRONTFEYN, Y.: *Werkstoffmodelle für Filtersheet - thermo-elastisches Verhalten - Abschlussbericht*. Freiburg : Fraunhofer IWM, 2005. – nicht-öffentlicher Forschungsbericht für die Robert Bosch GmbH

-
- [132] SCHMIDT-OTT, A.; BALTENSPERGER, U.; GÄGGELER, H. W.; JOST, D. T.: Scaling behaviour of physical parameters describing agglomerates. In: *Journal of Aerosol Science* 21 (1990), Nr. 6
- [133] SCHOMBURG, H.; DIETZEL, M.; MICHAELIS, B.; SOMMERFELD, M.; TEIKE, G.: Lattice Boltzmann model with dynamical grid refinement for multiphase flow around a single fibre. In: *6th International Conference on Multiphase Flow*, Leipzig, 2007
- [134] SCHULZ, H.: Cardiovascular Effects of Nanoparticles. In: *8th ETH-Conference on Combustion Generated Nanoparticles*. Zürich, 2004
- [135] SIMPSON, R. L.; MOFFAT, R. J.; KAYS, W. M.: The turbulent boundary layer on a porous plate: Experimental skin friction with variable injection and suction. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 12 (1969)
- [136] SI-SPECIAL INSTRUMENTS GMBH: *Druckmessen elektronisch*. <http://www.specialinstruments.com/pdf/20-21.pdf>. Produktdatenblatt, S.20-21 im Produktkatalog D2000. – Online-Ressource, Abruf: 11.04.2005
- [137] SMITH, I. W.: The combustion rates of coal chars: a review. In: *19th international symposium on combustion*. Philadelphia, 1982
- [138] SMITH, O. I.: Fundamentals of soot formation in flames with application to diesel engine particulate emissions. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 7 (1981)
- [139] SNELLING, D. R.; SMALLWOOD, G. J.; SAWCHUK, R. A.; NEILL, W. S.; GARREAU, D.; CLAVEL, D. J.; CHIPPIOR, W. L.; LIU, F.; GÜLDER, Ö. L.; BACHALO, W. D.: In-situ characterization of particulate emissions from a diesel engine exhaust by laser-induced incandescence. In: *SAE Paper* (2000), Nr. 2000-01-1994
- [140] SOMMER, R.: *Persönliche Korrespondenz*. Erlangen, Juni 2004
- [141] SORENSEN, C. M.; WANG, G. M.: Note on the correction for diffusion and drag in the slip regime. In: *Aerosol Science and Technology* 33 (2000)
- [142] SORENSEN, C. M.; ROBERTS, G. C.: The prefactor of fractal aggregates. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 186 (1997)

- [143] SPURK, J. H.: *Strömungslehre: Einführung in die Theorie der Strömungen*. vierte, neubearbeitete Auflage. Berlin : Springer-Verlag, 1996
- [144] STANMORE, B. R.; BRILHAC, J. J.; GILOT, P.: The oxidation of soot: a review of experiments, mechanisms and models. In: *Carbon* (2001), Nr. 39
- [145] STRATAKIS, G. A.: *Experimental investigation of catalytic soot oxidation and pressure drop characteristics in wall-flow diesel particulate filters*, University of Thessaly, Dissertation, 2004
- [146] SZEKELY, J.; EVANS, J. W.; SOHN, H. Y.: *Gas-solid reactions*. New York : Academic Press, 1976
- [147] TAN, J. C.; OPRIS, C. N.; BAUMGARD, K. J.; JOHNSON, J. H.: A study of the regeneration proces in diesel particulate traps using a copper fuel additive. In: *SAE Paper* (1996), Nr. 960136
- [148] TAVERA, E. M.: Analytical expression for the non-isothermal effectiveness factor: the n th-order reaction in a slab geometry. In: *Chemical Engineering Science* (2005), Nr. 60
- [149] THE MATHWORKS INC.: *MATLAB[®] Version 7.0.1 Documentation*. 2004
- [150] TSCHÖCKE, S.: *Korrelation von Filterfunktionseigenschaften mit der Korngrößenverteilung von Sintermetall-Halbzeugen*, Diplomarbeit in Zusammenarbeit mit der Robert Bosch GmbH, 2004
- [151] TSI Inc.: *Model 3010 Condensation Particle Counter Instruction Manual P/N 1933010, Revision F*. August 2002
- [152] TSI Inc.: *Model 3934 SMPS (Scanning Mobility Particle Sizer) Instruction Manual P/N 1930081, Revision F*. Oktober 2002
- [153] TSI Inc.: *Series 3080 Electrostatic Classifiers Instruction Manual P/N 1933792, Revision F*. März 2005
- [154] TURNS, S. R.: *An introduction to combustion: concepts and applications*. 2nd edition. Boston : McGraw-Hill, 2000 (McGraw-Hill series in mechanical engineering)
- [155] VANDER WAL, R. L.; TOMASEK, A. J.: Soot nanostructure: dependence upon synthesis conditions. In: *Combustion and Flame* 136 (2004)

-
- [156] VORTMEYER, D.: Strahlung technischer Oberflächen. In: VEREIN DEUTSCHER INGENIEURE (Hrsg.): *VDI Wärmeatlas, 8. Auflage*. Berlin : Springer-Verlag, 1997, Kapitel Ka
- [157] WANG, G. M.; SORENSEN, C. M.: Diffusive mobility of fractal aggregates over the entire Knudsen number range. In: *Physical Review E* 60 (1999), Nr. 3
- [158] WANG, G. M.; SORENSEN, C. M.: Aggregation kernel homogeneity for fractal aggregate aerosols in the slip regime. In: *Aerosol Science and Technology* 34 (2001)
- [159] WANGARD, W.; EGELJA, A.; METWALLY, H.: CFD simulations of transient soot trapping and regeneration in a diesel particulate filter. In: *SAE Paper* (2004), Nr. 2004-01-2658
- [160] WANKER, R.; WURZENBERGER, J. C.; PETERS, B.; TATSCHL, R.: Integrated 1D and 3D Modeling of Exhaust-Gas Aftertreatment Devices. In: *International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting*. Detroit, 2004
- [161] WARD, J. C.; ASCE, A. M.: Turbulent flow in porous media. In: *Journal of the Hydraulics Division, Proceedings of the American Society of Civil Engineers* (1964)
- [162] WARNATZ, J.; MAAS, U.; DIBBLE, R. W.: *Verbrennung*. 3. Auflage. Berlin : Springer-Verlag, 2001
- [163] WORLD HEALTH ORGANIZATION: *Health aspects of air pollution with particulate matter, ozone and nitrogen dioxide - Report on a WHO Working Group* (2003). <http://www.euro.who.int/document/e79097.pdf>. – Online-Ressource, Abruf: 24.01.2005
- [164] YAMASHITA, H.; TOMITA, A.; KYOTANI, H. Y.; RADOVIĆ, L. R.: Influence of char surface chemistry on the reduction of nitric oxide with chars. In: *Energy and Fuels* 7 (1993)
- [165] YEZERETS, A.; CURRIER, N. W.; EADLER, H.: Experimental determination of the kinetics of diesel soot oxidation by O₂ - modeling consequences. In: *SAE Paper* (2003), Nr. 2003-01-0833

- [166] YEZERETS, A.; CURRIER, N. W.; EADLER, H.; POPURI, S.; SURESH, A.: Quantitative flow-reactor study of diesel soot oxidation process. In: *SAE Paper* (2002), Nr. 2002-01-1684
- [167] ZAHORANSKY, R.; KERZENMACHER, S.; BENALI, G.; LAVIGNE, R.; KASSAB, J.; HENNEKE, D.; LAILE, E.: Particle emissions of the Jing-Cast burner examined by multi-wavelength particle analyzer. In: *SAE_NA Technical Paper Series* (2003), Nr. 2003-01-53
- [168] ZHANG, J.; MEGARIDIS, C. M.: Soot suppression by ferrocene in laminar ethylene / air nonpremixed flames. In: *Combustion and Flame* 105 (1996)
- [169] ZHANG, Z.; YANG, S. L.; JOHNSON, J. H.: Modeling and numerical simulation of diesel particulate trap performance during loading and regeneration. In: *SAE Paper* (2002), Nr. 2002-01-1019