Phänomenologische Modellierung der dieselmotorischen Kohlenwasserstoff- und Kohlenstoffmonoxidemissionen

Von der Fakultät Konstruktions-, Produktions- und Fahrzeugtechnik der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Christian Schnapp aus Kulmbach

Hauptberichter: Mitberichter: Prof. Dr.-Ing. Michael Bargende Prof. Dr. techn. Bernhard Geringer

Tag der mündlichen Prüfung:

28.09.2021

Institut für Fahrzeugtechnik Stuttgart Universität Stuttgart

2021

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Fahrzeugtechnik Stuttgart (IFS) der Universität Stuttgart unter der Leitung von Herrn Prof. Dr.-Ing. Michael Bargende.

An dieser Stelle danke ich besonders Herrn Prof. Dr.-Ing. Michael Bargende für die exzellente wissenschaftliche Betreuung während der Durchführung dieser Arbeit. Ebenfalls möchte ich Herrn Prof. Dr. techn. Bernhard Geringer für die Übernahme des Mitberichts danken.

Ein ausdrücklicher Dank gebührt ebenso den Kollegen des Teams 0D/1D-Simulation am IFS und dem Forschungsinstitut für Kraftfahrwesen und Fahrzeugmotoren Stuttgart (FKFS). Insbesondere möchte ich mich bei meinem Betreuer Dr. Michael Grill bedanken, der durch sein umfangreiches Fachwissen und seiner kontinuierlichen Unterstützung wesentlich zum Erfolg dieser Arbeit beigetragen hat. Darüber hinaus möchte ich auch die beiden Kollegen Dr. Qirui Yang und Dr. Dominik Rether hervorheben, die mit ihrer Expertise diese Arbeit über die gesamte Laufzeit begleitet haben.

Der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV) und der Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen (AiF), welche durch die finanzielle Förderung des Forschungsprojektes "HC/CO-Modell" diese Arbeit erst ermöglicht haben, gilt ebenfalls mein Dank. Für die ausgezeichnete Leitung des projektbegleitenden Arbeitskreises möchte ich mich hierbei auch bei Dr. Markus Wenig bedanken.

Ein besonderer Dank geht an meine Familie und meine Freund*innen für die außergewöhnliche Unterstützung, die ich während meiner gesamten akademischen Laufbahn erfahren habe.

Stuttgart, den 14.06.2021

Christian Schnapp

Inhaltsverzeichnis

Dank	sagungI
Abbi	ldungsverzeichnisV
Tabe	llenverzeichnisIX
Abkü	irzungsverzeichnisXI
Nom	enklaturXIII
Zusar	mmenfassungXVII
Abstı	ractXIX
1 E	Einleitung und Motivation1
2 S	Stand der Technik5
2.1	Quellen und Einflussfaktoren von HC- und CO-Emissionen5
2.2	Reaktionskinetische Modellierung von HC- und CO-Emissionen11
2.3	Emissionsmodelle zur Abbildung der HC- und CO-Emissionen 16
2.4	Phänomenologische Modelle nach Kožuch und Kaal
3 E	Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen
3.1	Daten des verwendeten Versuchsmotors25
3.2	Messaufbau und Messgeräte26
3.3	Messungen bezüglich HC- und CO-Emissionen
3.3	.1 Messung des Motorkennfeldes
3.3	.2 Variation der Brennraumwandtemperatur
3.3	.3 Variation des Luftverhältnisses

4	Modellierung der HC-Emissionen
4.1	Injektortröpfeln43
4.2	2 Ausmagerungseinfluss
4.3	Wandzoneneinfluss
4.4	Validierung des HC-Modells anhand des Versuchsmotors OM64250
4.5	Validierung des HC-Modells anhand des Versuchsmotors OM64654
5	Modellierung der CO-Emissionen61
5.1	CO-Oxidationsmechanismus61
5.2	2 Luftmangeleinfluss
5.3	Ausmagerungseinfluss71
5.4	Wandzoneneinfluss71
5.5	Validierung des CO-Modells anhand des Versuchsmotors OM64273
5.6	Validierung des CO-Modells anhand des Versuchsmotors OM64677
6	Qualitativer Vergleich des HC/CO-Modells
7	Anwendung des Modells an einem virtuellen
	versuchstrager85
8	Zusammenfassung und Ausblick95
Lite	eraturverzeichnis

IV

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1.1:	Grenzwerte der unterschiedlichen Abgasnormen in der EU für CO und HC + NOx für Pkw mit Dieselmotor [4]	2
Abbildung 2.1:	Dreischritt-Mechanismus zur Abbildung der CO- Bildung und CO-Oxidation [60]	15
Abbildung 2.2:	Vergleich zwischen gemessenen und mit SRM simulierten HC- und CO-Emissionen [50]	21
Abbildung 2.3:	Schematische Darstellung des Zweizonenmodells zur Stickoxid- und Rußberechnung nach Kožuch [35]	22
Abbildung 3.1:	Aufbau und Messstellen des OM642 [27]	27
Abbildung 3.2:	Flammenionisationsdetektor zur Messung der HC- Emissionen	28
Abbildung 3.3:	Nichtdispersiver Infrarot-Analysator zur Messung von CO und CO ₂	30
Abbildung 3.4:	Betriebspunkte der Kennfeldvermessung des Versuchsmotors OM642	31
Abbildung 3.5:	Lambda-Kennfeld des Versuchsmotors OM642	32
Abbildung 3.6:	Maximale Massenmitteltemperatur im Kennfeld des Versuchsmotors OM642	33
Abbildung 3.7:	oben: Gemessene HC-Emissionen im Kennfeld des Versuchsmotors OM642; unten: Anteil der Kraftstoffenergie in den HC-Emissionen	35
Abbildung 3.8:	oben: Gemessene CO-Emissionen im Kennfeld des Versuchsmotors OM642; unten: Anteil der Kraftstoffenergie in den CO-Emissionen	37

Abbildung 3.9:	Gemessene HC- und CO-Emissionen für die Kühlmittel- und Öltemperaturvariation in Abhängigkeit der mittleren Wandtemperatur
Abbildung 3.10:	Gemessene HC- und CO-Emissionen für die Lambda-Variation41
Abbildung 4.1:	Schematische Darstellung des Ausmagerungsmodells46
Abbildung 4.2:	Schematische Darstellung des Wandzonenmodells 48
Abbildung 4.3:	Aufteilung der HC-Emissionen auf unterschiedliche Zonen
Abbildung 4.4:	oben: HC-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: HC-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM64252
Abbildung 4.5:	Ergebnisse des HC-Modells ohne einzelne Untermodelle
Abbildung 4.6:	Betriebspunkte im Kennfeld des Versuchsmotors OM64655
Abbildung 4.7:	AGR-Rate und Verbrennungsschwerpunkte der Betriebspunkte des OM64656
Abbildung 4.8:	oben: HC-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: HC-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM64657
Abbildung 4.9:	Abweichung für individuelle und gemittelte Parameter sowie durchschnittliche Kraftstoffenergie in HC-Emissionen für OM642 und OM64659
Abbildung 5.1:	Vorgehen zur Entwicklung eines Einschritt- Reaktionsmechanismus für die Oxidation von CO62
Abbildung 5.2:	Zustände in der verbrannten Zone im Temperaturbereich 1200 bis 1700 K hinsichtlich Druck und Luftverhältnis im Kennfeld des OM64264

Abbildung 5.3:	Verlauf der CO-Oxidation für ausgewählte Bedingungen in der verbrannten Zone für den detaillierten und den reduzierten Mechanismus
Abbildung 5.4:	Optimierte Geschwindigkeitskonstante für reduzierten Mechanismus für unterschiedliche Bedingungen der verbrannten Zone
Abbildung 5.5:	links: Geschwindigkeitskonstante des reduzierten Mechanismus; rechts: Parameter zur Berechnung der Geschwindigkeitskonstante des reduzierten Mechanismus und Bestimmtheitsmaß
Abbildung 5.6:	Schematische Darstellung des Fettzonenmodells68
Abbildung 5.7:	Abhängigkeit des Faktors $f_{\lambda,Zyl}$ zur Berücksichtigung des Luftverhältnisses auf die Fetteinmischung
Abbildung 5.8:	Aufteilung der CO-Emissionen auf unterschiedliche Zonen
Abbildung 5.9:	oben: CO-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: CO-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM64275
Abbildung 5.10:	Ergebnisse des CO-Modells ohne einzelne Untermodelle76
Abbildung 5.11:	oben: CO-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: CO-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM64678
Abbildung 5.12:	Abweichung für individuelle und gemittelte Parameter sowie durchschnittliche Kraftstoffenergie in CO-Emissionen für OM642 und OM64680
Abbildung 6.1:	oben: Vergleich zwischen gemessenen und simulierten HC-Emissionen; unten: Vergleich zwischen gemessenen und simulierten CO- Emissionen
Abbildung 7.1:	HC-Emissionen im Motorkennfeld des virtuellen Versuchsträgers in ppm

Abbildung 7.2:	Aufteilung der HC-Emissionen bei 2000 U/min und unterschiedlicher Last für den virtuellen Versuchsträger	87
Abbildung 7.3:	Verluste durch CO-Emissionen im Motorkennfeld des virtuellen Versuchsträgers in Prozent	88
Abbildung 7.4:	Aufteilung der CO-Emissionen bei Volllast und bei 2000 U/min und unterschiedlicher Last für den virtuellen Versuchsträger	89
Abbildung 7.5:	Motordrehzahl und effektiver Mitteldruck für einen Beschleunigungsvorgang einer RDE-Simulation	91
Abbildung 7.6:	Vergleich von HC- und CO-Emissionen für stationäre bzw. transiente Betrachtung	92
Abbildung 7.7:	oben: Aufteilung der CO-Emissionen für transiente Betrachtung; unten: Aufteilung der CO-Emissionen für stationäre Betrachtung	93

Tabellenverzeichnis

Tabelle 3.1:	Kenngrößen des vermessenen Motors OM642 [27, 66]	26
Tabelle 3.2:	Gemessene Abgaskomponenten und verwendete Messgeräte	28
Tabelle 3.3:	Betriebsbedingungen der durchgeführten Variation der Kühlmittel- und Öltemperatur	38
Tabelle 3.4:	Betriebsbedingungen der durchgeführten Variation des Luftverhältnisses	40
Tabelle 4.1:	Abstimmparameter des HC-Modells für den OM642	51
Tabelle 4.2:	Kenngrößen des Einzylinder-Versuchsmotors basierend auf dem OM646	54
Tabelle 4.3:	Individuelle Abstimmparameter des HC-Modells für den OM642 und den OM646 sowie gemittelte Werte	58
Tabelle 5.1:	Abstimmparameter des CO-Modells für den OM642	74
Tabelle 5.2:	Individuelle Abstimmparameter des CO-Modells für OM642 und OM646 sowie gemittelte Werte	79

Abkürzungsverzeichnis

AGR	Abgasrückführung
CLD	Chemilumineszenz-Detektor
CNG	Compressed Natural Gas
CO	Kohlenstoffmonoxid
FE	Finite-Elemente
FID	Flammenionisations-Detektor
HC	Kohlenwasserstoff
HD	Hochdruckphase
KBA	Kraftfahrt-Bundesamt
Lkw	Lastkraftwagen
NDIR	Nichtdispersiver Infrarot-Analysator
NEFZ	Neuer Europäischer Fahrzyklus
NOx	Stickoxide
OME	Oxymethylenether
PDF	Probability Density Function
Pkw	Personenkraftwagen
PMD	Paramagnetischer Sauerstoff Detektor
RDE	Real Driving Emissions
VTG	Variable Turbinengeometrie
WLTC	Worldwide harmonized Light vehicles Test Cycle
ZOT	Oberer Totpunkt des Arbeitstaktes

Nomenklatur

Lateinische Symbole

Α	Präexponentieller Faktor	
а	Anteil der fetten Zone im NO-Modell	-
Α	Abstimmparameter der fetten Zone im NO- Modell	-
Anz_D	Spritzlöcher des Injektors	-
bco	Dicke der Randzone im CO-Modell	m
<i>b_{HC}</i>	Dicke der Randzone im HC-Modell	m
bmi	Randeinmischfunktion	-
b_{NO}	Dicke der Randzone im NO-Modell	m
С	Kraftstoffkonzentration	-
С	Abstimmparameter der Randzone im NO- Modell	m
<i>C</i> _{1,,5}	Parameter der Geschwindigkeitskonstanten	
C_{C}	Kraftstoffkonzentration auf der Sprayachse	-
CCO,Ausm	Abstimmparameter für das Ausmagern im CO- Modell	kg∙s/m
C _{CO,RZ}	Abstimmparameter der Randzone im CO- Modell	-
C _{f,CO}	Abstimmparameter der Bildung der fetten Zone im CO-Modell	-
CFZ,mix	Parameter für Funktion zur Berücksichtigung des globalen Lambdas im CO-Modell	-
Cg	Abstimmparameter des Zumischmassenstroms	-
С _{g,CO}	Abstimmparameter der Einmischung der fetten Zone im CO-Modell	-
Cga	Abstimmparameter des Zumischmassenstroms	-

C HC,Ausm	Abstimmparameter für das Ausmagern im HC- Modell	kg∙s/m
CHC,Inj	Abstimmparameter des Injektortröpfelns	-
C _{HC,RZ}	Abstimmparameter der Randzone im HC- Modell	-
d	Zylinderbohrung	m
Ε	Abstimmparameter der Randzone im NO- Modell	-
EA	Aktivierungsenergie	J/mol
F	Abstimmparameter der Randzone im NO- Modell	m
f _{CO,Ausm}	Anteil des ausmagernden CO	-
f _{FZ,CO}	Anteil der fetten Einspritzung	-
f _{HC,Ausm}	Anteil des ausmagernden HC	-
$f_{\lambda,Zyl}$	Funktion zur Berücksichtigung des globalen Lambdas im CO-Modell	-
g	Zumischmassenstrom	kg/s
hот	Abstand Kolben zu Zylinderkopf im oberen Totpunkt	m
H_u	Unterer Heizwert	J/kg
k	Geschwindigkeitskonstante einer Reaktion	
k	Turbulente kinetische Energie	$m^2\!/s^{\textbf{2}}$
L _{st}	Stöchiometrischer Luftbedarf	-
m	Masse	kg
m	Parameter der Reaktionsordnung	-
m_B	Brennstoffmasse	kg
<i>m_{HC,Inj}</i>	Masse der HC-Emissionen durch Injektortröpfeln	kg
<i>m_{tInj}</i>	Gesamtmasse einer Einspritzung	kg
n	Parameter der Reaktionsordnung	-
n	Motordrehzahl	U/min

0	Abstimmparameter der fetten Zone im NO- Modell	-
Р	Abstimmparameter der fetten Zone im NO- Modell	-
p_{me}	Effektiver Mitteldruck	bar
p_{mi}	Indizierter Mitteldruck	bar
r	Radius	m
R	Universelle Gaskonstante	J/mol/K
<i>R</i> ²	Bestimmtheitsmaß	-
R_{adj}^2	Adjustiertes Bestimmtheitsmaß	-
<i>r</i> _m	Sprayradius	m
<i>S</i> _p	Kolbenposition	m
t	Zeit	S
Т	Temperatur	Κ
T _{Wand}	Wandtemperatur	Κ
u	Turbulenzgeschwindigkeit	m/s
V	Volumen	m³
V _{Inj}	Injektorvolumen	m³
X	Anzahl Kohlenstoffatome eines Kohlenwasserstoffes	-
XAGR	Restgasgehalt	-
X _{Krst,} HC	Anteil der Kraftstoffenergie in HC-Emissionen	-
XKrst,CO	Anteil der Kraftstoffenergie in CO-Emissionen	-
X _{mRZ}	Modifizierte Randzone	-
X02	Molanteil Sauerstoff	-
X0 ₂ ,Luft	Molanteil Sauerstoff in Luft	-
X _{RZ}	Anteil des Randzonenvolumens	-
У	Anzahl Wasserstoffatome eines	-
	IXOIIICII w abbel bioliteb	

Griechische Symbole Turbulenzdissipation m^2/s^3 ε Luftverhältnis λ -Dichte kg/m³ ρ Kurbelwinkel °KW φ Magere Zündgrenze ϕ_m -

Indizes

AIFT	Adiabat-isobare Flammentemperatur
ΑÖ	Auslassventil öffnet
ES	Einlassventil schließt
FL	Frischluft
FZ	Fette Zone
g	Gewichtet
GG	Gleichgewicht
i	Zählindex
Inj	Einspritzung
Krst	Kraftstoff
т	Modifiziert
mix	Einmischung
Ox	Oxidation
Turb	Turbulenz
UV	Unverbrannt
uvZ	Unverbrannte Zone
V	Verbrannt
νZ	Verbrannte Zone
Zyl	Zylinder

Zusammenfassung

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

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

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

Das HC/CO-Modell wurde anhand von zwei unterschiedlichen Dieselmotoren, welche auf dem OM642 und dem OM646 basieren, abgestimmt und validiert. Die HC- und CO-Messergebnisse konnten mit dem Simulationsmodell gut wiedergegeben werden. Hierbei zeigte sich für das HCund das CO-Modell, dass eine separate Abstimmung des Wandzonenmodells für den OM646 keine wesentliche Verbesserung mit sich bringt, was wiederum im Ergebnis den Abstimmprozess verringert. Des Weiteren konnte gezeigt werden, dass mit einem aus beiden Abstimmungen gemittelten Parametersatz eine hinreichend gute Vorhersagefähigkeit für beide Motoren gegeben werden kann. Durch einen Vergleich hinsichtlich des Bestimmtheitsmaßes HC/CO-Modells mit Ergebnissen des eines Stickoxid/Ruß-Modells wird die Qualität des Modells bestätigt. Mittels Anwendung des Modells an einem virtuellen Versuchsträger wird gezeigt, wie das Modell im Motorentwicklungsprozess frühzeitig helfen kann, die Menge an HC- und CO-Emissionen sowie deren Ursache zu detektieren.

Abstract

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

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

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

The HC/CO model was calibrated using two different diesel engines, one based on the OM642 and one based on the OM646. The HC and CO measurement results were well reproduced with the simulation model. The HC and the CO model showed that a separate calibration of the peripheral zone model for the OM646 does not result in any significant improvement, which in turn reduces the calibration process. Furthermore, it could be shown that with a parameter set averaged from both calibrations, a sufficiently good prediction capability can be given for both engines. The quality of the model is confirmed by comparing the coefficient of determination of the HC/CO model with the results of an nitrogen oxide/soot model. By applying the model to a virtual test engine, it is shown how the model can help to not just detect the amount of HC and CO emissions but also their source at an early stage in the engine development process.

1 Einleitung und Motivation

Mehr als 100 Jahre nach seiner Erfindung spielt der Dieselmotor noch immer eine bedeutende Rolle für die Mobilität von heute. So beträgt der Bestand an Personenkraftwagen (Pkw) mit Dieselmotor in Deutschland zum 01.01.2020 laut Kraftfahrt-Bundesamt (KBA) über 15,1 Mio., was einem Anteil von knapp 32% entspricht [37]. Der Bestand hält sich in den letzten Jahren auf konstant hohem Niveau und liegt sogar deutlich über dem Bestand des Jahres 2015, als bekannt wurde, dass ein Automobilkonzern eine illegale Abschalteinrichtung in seinen Dieselfahrzeugen eingesetzt hat [34]. Im Bereich der Lastkraftwagen (Lkw) zeigt sich anhand des Bestandes zu Beginn des Jahres 2019 die enorme Bedeutung des Dieselmotors mit einem Anteil von über 94% [36]. Ein wesentlicher Grund für die hohe Marktdurchdringung liegt hierbei in der hohen Wirtschaftlichkeit des Dieselmotors. Entsprechend lässt sich folgern, dass der Dieselmotor nichts an seiner Aktualität verloren hat und auch Gegenstand weiterer Forschungs- und Entwicklungsarbeit sein wird.

Die Auseinandersetzung mit HC- und CO-Emissionen beim Dieselmotor spielt dabei in zweierlei Hinsicht eine wichtige Rolle. Zum einen ist der Ausstoß dieser Emissionen durch den Gesetzgeber limitiert. In Abbildung 1.1 sind die Grenzwerte der unterschiedlichen EU-Emissionsstandards für Diesel-Pkw für die beiden Emissionen eingetragen. Während CO alleine limitiert ist, gilt ein Grenzwert für die Summe aus HC und Stickoxiden (NOx). Während ab der Abgasnorm Euro 4 der Grenzwert für CO konstant geblieben ist, wurde die zulässige Masse für die Summe aus HC und NOx weiter reduziert. Für zukünftige Abgasnormen kann mit einer weiteren Herabsetzung der Grenzwerte gerechnet werden – mit einem Vorschlag der EU-Kommission bezüglich der Euro 7 Norm ist voraussichtlich im letzten Quartal des Jahres 2021 zu rechnen [9].

Neben den geringeren Grenzwerten ergeben sich durch geänderte Prüfzyklen höhere Anforderungen an das Gesamtsystem. Durch den Umstieg vom Neuen Europäischen Fahrzyklus (NEFZ) auf den Worldwide harmonized Light vehicles Test Cycle (WLTC) resultieren deutlich dynamischere Fahrzustände. Durch Messungen im realen Fahrbetrieb, was unter den Begriff Real Driving Emissions (RDE) fällt, kommt als weitere Herausforderung hinzu, dass es kein vordefiniertes Fahrprofil mehr gibt. Um unter diesen Bedingungen weiterhin die Abgasnorm einzuhalten, sollten bereits die Rohemissionen durch innermotorische Maßnahmen möglichst geringgehalten werden.



Abbildung 1.1: Grenzwerte der unterschiedlichen Abgasnormen in der EU für CO und HC + NOx für Pkw mit Dieselmotor [4]

HC- und CO-Emissionen spielen allerdings auch aus verbrauchstechnischer Sicht eine wichtige Rolle. In diesen Emissionen steckt noch ein Teil der chemisch gebundenen Energie des Kraftstoffes, der folglich ungenutzt bleibt. Während der untere Heizwert von Dieselkraftstoff bei 42,9 MJ/kg liegt, beträgt der untere Heizwert für Propan, das für die HC-Messung als Referenzgas verwendet wird, 46,4 MJ/kg. Der Wert für CO liegt mit 10,1 MJ/kg deutlich darunter, was allerdings am vergleichsweise schweren Sauerstoffatom liegt. Betrachtet man die Kette der Wärmefreisetzung wird durch die Oxidation von CO zu CO₂ etwa 45% der im Kraftstoff gespeicherten Energie frei [45]. Entsprechend besteht bei der Entwicklung des Dieselmotors auch aus Sicht des Kraftstoffverbrauches ein hohes Interesse, die HC- und CO-Emissionen möglichst gering zu halten. [16]

Der Kraftstoffverbrauch lässt sich in einen CO₂-Ausstoß umrechnen, der wiederum gesetzlichen Vorgaben unterliegt. So wurde in [3] ein ab 2020

geltendes Ziel für die Neuwagenflotte in der EU von 95 g CO₂/km festgelegt, was einem Verbrauch an Dieselkraftstoff von 3,61 auf 100 km entspricht. Hierbei gelten allerdings Sonderregelungen: Zum Beispiel werden besonders verbrauchsarme Fahrzeuge stärker gewichtet. Außerdem ist der Grenzwert für einzelne Hersteller abhängig von der Fahrzeugmasse der Flotte. Je größer die Masse ist, desto höher ist der zulässige CO₂-Ausstoß, ab dem die Strafzahlung für Überschreitung erhoben wird. Um entsprechende Zahlungen zu vermeiden, besteht somit auch ein erkennbares wirtschaftliches Interesse seitens der Fahrzeughersteller, bereits innermotorisch die HC- und CO-Emissionen möglichst gering zu halten.

Die Simulation nimmt heutzutage eine wichtige Stellung im Motorentwicklungsprozess ein, da mit ihr der Umfang zeitaufwendiger und teurer Prüfstandversuche reduziert werden kann. Die 0D/1D-Simulation bietet sich hierbei als wichtiges Entwicklungswerkzeug an. Sie benötigt nur relativ Rechenzeiten und bietet durch die Verwendung geringe von phänomenologischen Modellen dennoch eine hohe Vorhersagefähigkeit. Dadurch eignet sich die 0D/1D-Simulation für die Untersuchung unterschiedlicher Motorkonzepte für stationäre und transiente Bedingungen ohne Kenntnis der detaillierten Motorgeometrien. Somit lassen sich unter anderem Ladungsbewegungen und Turbulenz, aber auch die Dieselverbrennung simulieren. Basierend auf einem an sich, phänomenologischen Zweizonenmodell lassen sich aktuell Stickoxid- und Rußemissionen berechnen [35]. Eine Simulation der HC- und CO-Emissionen ist jedoch bislang im Rahmen dieses Modellansatzes nicht möglich. Die Kenntnis dieser Emissionen ist jedoch für eine exakte Vorhersage des Kraftstoffverbrauchs unverzichtbar. Bei dem erreichten hohen Stand der Dieselmotorentechnik sind Verbesserungen des Kraftstoffverbrauchs nur noch mit hohem Aufwand zu erreichen. Oft sind mit verschiedenen Maßnahmen nur noch Reduktionen des Verbrauchs von wenigen Prozentpunkten möglich. Entsprechend ist es notwendig geworden, den Kraftstoffverbrauch in der Simulation mit mindestens einer solchen Genauigkeit vorhersagen zu können. Für eine derart präzise Vorhersage des Kraftstoffverbrauchs müssen die HCund CO-Emissionen eines Motors zwingend berücksichtigt werden, da in verschiedenen Bereichen des Kennfelds über diese Emissionen bereits Energie der Magnitude der angestrebten Vorhersagegüte verloren geht.

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

4

2 Stand der Technik

In diesem Kapitel soll der aktuelle Stand der Technik dargelegt werden. Zunächst wird dabei auf bereits in der Literatur dargelegte Quellen und Einflüsse auf HC- und CO-Emissionen eingegangen. Im Anschluss werden existierende Reaktionsmechanismen sowie bereits vorhandene Modelle zur Abbildung der Emissionen vorgestellt. Zuletzt soll das phänomenologische Modell nach Kožuch [35] sowie dessen Erweiterung nach Kaal [26] erläutert werden, da dieses Modell den Stand der Technik in der quasidimensionalen Modellierung der Stickoxid- und Rußemissionen darstellt und das entwickelte HC/CO-Modell auf dieser zweizonigen Modellierung aufbaut.

2.1 Quellen und Einflussfaktoren von HC- und CO-Emissionen

Für die Modellierung der Emissionen ist es zunächst essentiell, die wesentlichen lokalen Quellen und Einflussfaktoren für die Entstehung der Emissionen zu bestimmen und sich auf diese zu fokussieren. Bereiche, in denen CO nur als Zwischenprodukt auftritt und durch bestimmte Randbedingungen nahezu vollständig zu CO₂ weiteroxidiert, müssen nicht zwangsweise modelliert werden. Ein ähnliches Vorgehen findet sich bereits bei der dieselmotorischen Stickoxidmodellierung. Da thermisches NO den mit Abstand größten Anteil der Stickoxide ausmacht, wird praktisch in allen Modellen lediglich dessen kinetisch kontrollierte Bildung mit Hilfe des erweiterten Zeldovich-Mechanismus beschrieben [26].

Zunächst werden die wesentlichen Quellen und Einflussfaktoren von HC-Emissionen untersucht. Experimentelle Untersuchungen, die im Wesentlichen zu ähnlichen Ergebnissen kommen, finden sich hierzu in [2, 15, 70, 71]. Als eine Hauptquelle werden HC-Emissionen durch Ausmagerung (engl. overmixing) genannt [2, 15, 70, 71]. Dies tritt in Bereichen auf, in denen durch Vermischung des eingespritzten Kraftstoffes mit der Brennraumluft ein sehr mageres Gemisch entsteht. Durch den hohen Luftüberschuss ist der Temperaturanstieg durch die Wärmefreisetzung des Kraftstoffes gering, was eine langsame Oxidation zur Folge hat. Als Kraftstoffverhältnis der mageren Zündgrenze ϕ_m wird in [70] ein Wert von 0,3 angegeben, in [15] wird für ϕ_m eine Spanne von 0,1 bis 0,3 für dieselmotorische Bedingungen genannt. Für eine Konzentrationsverteilung des Sprays, wie sie zum Beispiel in [58, 70] angenommen wird, sind diese Emissionen somit lokal dem äußeren Sprayrand zuzuordnen.

Für unterschiedliche Parametervariationen wird in experimentellen Untersuchungen ein Anstieg der HC-Emissionen mit zunehmendem Zündverzug festgestellt [15, 70, 71]. Je länger der Zündverzug ist, umso mehr Zeit bleibt der Gemischaufbereitung, um Bereiche zu bilden, die außerhalb der mageren Zündgrenze liegen. Ein Zusammenhang zwischen der Menge an ausgemagertem Kraftstoff und der Mischungsrate, dem Zündverzug und der mageren Zündgrenze wird in [70] postuliert.

Eine Variation des Einspritzzeitpunktes wurde in [15] und [70] durchgeführt. In beiden Fällen konnte, ausgehend vom Einspritzzeitpunkt mit geringstem Zündverzug, ein Anstieg der HC-Emissionen bei längerem Zündverzug festgestellt werden [15]. Der Anstieg der HC-Emissionen ist dabei für spätere Einspritzzeitpunkte deutlich höher als für frühere. Dies kann damit erklärt werden, dass für frühere Einspritzungen mehr Zeit für die Oxidation vorhanden ist und die durch fortschreitende Kompression bedingte Temperaturerhöhung die Oxidation begünstigt.

Ein Einfluss des globalen Luftverhältnisses auf die HC-Emissionen wurde ebenso untersucht [2, 15, 70]. Durch den zunehmend mageren Betrieb des Motors ist ein Anstieg der HC-Emissionen zu verzeichnen. Es wird angenommen, dass sich dabei vermehrt lokal ausgemagerte Bereiche bilden, in denen der Kraftstoff nur schlecht oxidiert. In [15] und [70] wird ein starker Anstieg der HC-Emissionen ebenso bei zu geringen Luftverhältnissen festgestellt, wenn der Motor also nahe bzw. unterhalb der Stöchiometrie betrieben wird.

Die Untersuchungen aus [2, 15, 70] zeigen außerdem, dass sich die HC-Emissionen durch höhere Einlasstemperaturen, höhere Verdichtungsverhältnisse oder eine höhere Cetanzahl reduzieren lassen. Ein wesentlicher Effekt ist hierbei die Reduzierung des Zündverzuges, der, wie bereits erwähnt, den Anteil des ausmagernden Kraftstoffes reduziert.

Eine weitere Quelle der HC-Emission stellen wandnahe Bereiche dar, in denen durch die lokal geringeren Temperaturen sowie eine mögliche Interaktion zwischen Spray und Wand keine beziehungsweise nur eine stark reduzierte Oxidation von Kraftstoff stattfinden kann. In [15] wurden mehrere Motoren unterschiedlicher Hubvolumina untersucht. Mit zunehmendem Hubvolumen wurde dabei eine Abnahme der HC-Emissionen festgestellt. Dies bekräftigt die These eines existierenden Wandeinflusses, da bei kleineren Motoren der eingespritzte Kraftstoff schneller in Wandbereiche eintritt. Nimmt man eine Randzone mit konstanter Dicke an, in der die Temperaturen für die Kraftstoffoxidation zu gering sind, so würde diese bei kleineren Motoren einen größeren Anteil des Zylindervolumens einnehmen. In [70] wird eine Variation der Öl- und Kühlmitteltemperatur durchgeführt. Hierdurch kann die Zylinderwandtemperatur beeinflusst werden. Mit höheren Zylinderwandtemperaturen ergeben sich dabei geringere HC-Emissionen. Dies wird darauf zurückgeführt, dass Wandverlöschungseffekte mit zunehmender Zylinderwandtemperatur abnehmen. Ähnliche Ergebnisse liefern auch neuere Untersuchungen für einen Motor mit Benzin-Direkteinspritzung [61].

Eine weitere Hauptquelle für HC-Emissionen stammt aus Kraftstoff, der nach dem Ende der eigentlichen Einspritzung langsam aus dem Injektor austropft und entsprechend nachfolgend als Injektortröpfeln bezeichnet wird (engl. injector dribble). Die experimentellen Untersuchungen in [15] und [71] umfassen die Verwendung von Injektoren mit unterschiedlichen Sacklochvolumina. In beiden Fällen konnte ein Anstieg der HC-Emissionen mit höherem Sacklochvolumen gemessen werden. Die HC-Konzentration im Abgas in Abhängigkeit des Sacklochvolumens lässt anhand der beiden Publikationen einen annähernd linearen Zusammenhang vermuten.

Experimentelle Untersuchungen zum Injektortröpfeln wurden außerdem in [62] durchgeführt. Hierbei wurde das Verhalten eines Einloch-Dieselinjektors in einer Druckkammer im Bereich des Endes der Einspritzung untersucht. Mithilfe von Röntgenstrahlen konnten Aufnahmen aus dem Inneren des Injektors gemacht werden. Diese zeigten, dass nach dem Schließen der Injektornadel Gasblasen innerhalb des Injektors vorlagen. Ebenso wurde der druckkammerseitige Bereich am Einloch-Injektor untersucht. Aufnahmen zeigten, dass es zu einem Austritt von Kraftstoff aus dem Injektor nach dem eigentlichen Ende der Einspritzung kam. Durch die Gasblasen wurde folglich Kraftstoff aus dem Injektor verdrängt. In [62] werden zwei grundsätzlich mögliche Ursachen für die Existenz der Gasblasen innerhalb des Injektors genannt. Beim Schließen der Injektornadel kommt es zu einem starken lokalen Druckabfall. Fällt der Druck unter den Dampfdruck des Kraftstoffes, bilden sich Dampfblasen. Allerdings liegt der Dampfdruck deutlich unter den Drücken in der Druckkammer. Zudem müssten die gebildeten Blasen in sich zusammenfallen, wenn sich nach kurzer Zeit der Druck im Injektor dem Druck der Gaskammer angleicht. Dies ist allerdings nicht der Fall. Daher wird in [62] davon ausgegangen, dass nach dem Ende der Einspritzung Gas aus der Druckkammer in den Injektor gelangt und ein entsprechendes Kraftstoffvolumen verdrängt. Diese These wird dadurch gestützt, dass in einigen Hochgeschwindigkeitsaufnahmen die Bewegung der Blasen von der Düse in Richtung Injektorsackloch zu erkennen war. Die Untersuchungen in [62] umfassten auch eine Variation der Parameter Düsenlochdurchmesser, Einspritzdruck und Umgebungsdruck. Es konnte dabei ein Anstieg des Injektortröpfelns mit größerem Düsenlochdurchmesser, höherem Raildruck und geringerem Umgebungsdruck detektiert werden. [62]

In der Literatur finden sich auch Untersuchungen zum Injektortröpfeln an einem optisch zugänglichen Heavy-Duty Dieselmotor [7]. Ein wesentlicher Unterschied zu den Untersuchungen in der Druckkammer aus [62] besteht in der zeitlichen Änderung des Druckes innerhalb des Zylinders. Hierbei konnte gezeigt werden, dass sich das Phänomen des Injektortröpfelns grob in drei Bereiche einteilen lässt. Zunächst findet das unmittelbare Injektortröpfeln (engl. immediate dribble) statt, welches kurz nach Ende der Einspritzung einsetzt. Im weiteren Verlauf der Hochdruckphase (HD) kommt es zum spätphasen Injektortröpfeln (engl. late cycle dribble), welches während der Expansion eintritt. Dieses ist nach [7] scheinbar mit dem Zylinderdruck verknüpft und fand in allen untersuchten Betriebspunkten bei einem Zylinderdruck von 12 bis 20 bar statt. Zuletzt findet das Blow-down-Injektortröpfeln (engl. blow-down dribble) statt, welches mit dem Öffnen der Auslassventile einsetzt. Aufgrund der mit fortschreitender Expansion sinkenden Zylindertemperatur lässt sich grundsätzlich sagen, dass mit später einsetzendem Injektortröpfeln die Oxidationsmöglichkeit des austretenden Kraftstoffes geringer wird.

kombinierte **3D-CFD-Simulation** Eine Untersuchung aus und Prüfstandsmessungen hinsichtlich der Quellen der HC-Emissionen in Heavy-Duty Dieselmotoren findet sich in [31]. Hierbei wurden mittels schnellem Flammenionisationsdetektor die **HC-Emissionen** im Auslasskanal kurbelwinkelaufgelöst gemessen. Ein Vergleich der Messung mit der Simulation zeigte, dass ein Großteil der HC-Emissionen aus dem Bereich des Feuerdecks, also der Nähe des Injektors, entstammt. Eine Berücksichtigung des Injektortröpfelns in der Simulation führte zu einer Verbesserung der quantitativen Vorhersage der HC-Emissionen. In [31] wird vermutet, dass 25 bis 50% des Sacklochvolumens zum Injektortröpfeln beitragen. Des Weiteren wird davon ausgegangen, dass je nach Betriebspunkt 75 bis 90% der gesamten HC-Emissionen auf Dribble zurückgeführt werden können. In [32] wurden die Untersuchungen aus [31] unter anderem hinsichtlich der Menge an Kraftstoff, die nach dem Ende der Einspritzung aus dem Injektor tritt, fortgeführt. Als Durchschnittswert wird angegeben, dass das Injektortröpfeln 18% des Sacklochvolumens umfasst.

Für CO-Emissionen finden sich gewisse Ähnlichkeiten zu den HC-Emissionen, was die Quellen der Emissionen anbelangt. Grundvoraussetzung für diese Quellen ist dabei, dass sich zunächst CO aus dem eingespritzten Kraftstoff bildet. In [14] werden die bereits für HC bekannten Quellen des Injektortröpfelns und des Ausmagerns genannt. Zusätzlich wird als wichtige Quelle CO aus lokal unterstöchiometrischen Bereichen genannt, was vor allem bei hoher Last auftritt. Des Weiteren lässt sich ein Einfluss von Wandeffekten auf die CO-Emissionen anhand bestehender Literaturquellen argumentativ begründen. Dieser Effekt wurde bereits für die HC-Emissionen ausgemacht. Ein Wandeinfluss auf die NO-Emissionen (hier sowie im Folgenden wird vereinfacht von NO statt von NOx gesprochen) wurde in [27] gezeigt. Da es somit einen Effekt auf noch nicht vollständig oxidierten Kraftstoff (HC) sowie einen Effekt auf bereits verbrannte Bereiche hinter der Flamme (NO) gibt, lässt sich ebenso ein Effekt auf Bereiche, in denen durch unvollständige oder unvollkommene Verbrennung CO gebildet wurde, begründen. Die Tatsache, dass die kinetisch kontrollierte Oxidation von CO in einem Bereich zwischen der kinetisch kontrollierten Bildung von NO bzw. Oxidation von HC liegt, unterstreicht diese Argumentation.

Messungen zur Untersuchung einzelner Effekte auf die CO-Emissionen wurden in [2, 18, 29, 30, 41, 51] durchgeführt. Variationen des Luftverhältnisses wurden in [41] und [2] durchgeführt. Ein Anstieg der CO-Emissionen ist für einen sehr mageren Motorbetrieb sowie einen Betrieb in Richtung der Stöchiometrie erkennbar. Basierend auf den Ursachen der Emissionen ist der Anstieg auf CO durch Ausmagerung bzw. auf CO aus lokal fetten Bereichen zurückzuführen. Ein Anstieg von CO für vergleichsweise magere Betriebsbedingungen liegt somit vor, obwohl durch die höheren HC-Emissionen insgesamt weniger CO gebildet wird. Folglich muss die Weiterreaktion von CO zu CO₂ verstärkt gehemmt sein.

Verschiedene Parameter, die die Einspritzung betreffen, wurden ebenfalls untersucht [2, 18, 51]. Variationen des Einspritzzeitpunktes [2, 51] zeigen, dass eine Verschiebung der Einspritzung in Richtung spät zu höheren CO-Emissionen führt. Wie bereits für die HC-Emissionen können die kürzere Zeitspanne bis zum Öffnen des Auslassventils als auch die geringeren Verbrennungstemperaturen als Ursachen genannt werden. Die durchgeführte Raildruckvariation in [51] zeigte mit zunehmendem Einspritzdruck eine Reduzierung der CO-Emissionen. Die bessere Gemischaufbereitung führt zu einer Reduzierung lokal fetter Regionen. Die Ergebnisse aus [18] zeigen ebenfalls eine Abnahme der CO-Emissionen mit steigender Einspritzrate.

Durch höhere Einlasstemperaturen lassen sich CO-Emissionen reduzieren [2, 41]. Ein höheres Potential zur Reduzierung bei gleicher Einlasstemperatur ergibt sich hierbei bei höherem Luftüberschuss. Hierbei profitiert die CO-Oxidation in lokal mageren Bereichen von der höheren Temperatur im Brennraum. Durch Verwendung einer Wassereinspritzung im Einlasskanal ergibt sich der gegenteilige Effekt [41]. Durch die Verdampfung des Wassers werden die Brennraumtemperaturen abgesenkt, was zu einem Anstieg der CO-Emissionen führt.

Die Auswirkungen des Dralls auf die CO-Emissionen wurden in [30] untersucht. Demnach verringert ein erhöhtes Drallniveau die CO-Emissionen,

wobei der Drall allerdings einen zwei- bis dreimal stärkeren Effekt auf die Rußemissionen hat. Nach [30] kann das Drallniveau zwei Quellen der CO-Emissionen beeinflussen: Mit einem höheren Drall ist davon auszugehen, dass es zu einem stärkeren Ausmagerungseffekt kommen kann. Durch die bessere Einmischung von Luft werden allerdings gleichzeitig lokal unterstöchiometrische Bereiche reduziert.

2.2 Reaktionskinetische Modellierung von HC- und CO-Emissionen

In diesem Kapitel werden Möglichkeiten zur reaktionskinetischen Modellierung der Emissionen vorgestellt. Hierbei geht es um die Beschreibung der HC- und CO-Emissionskonzentrationen über geeignete Bildungs- und Oxidationsvorgänge durch chemische Reaktionen. Unter ausreichend hohen Temperaturen sind für beide Emissionen die Oxidationsraten so hoch, dass in einer ersten Näherung von Konzentrationen im Gleichgewichtszustand ausgegangen werden kann. Zum Ende der Hochdruckphase hin sinken allerdings, bedingt durch die Expansion, die Brennraumtemperaturen, was zu einer kinetisch kontrollierten Oxidation führen kann. Diese hat einen wesentlichen Einfluss auf die Gesamtemissionen, da sie bestimmt, welcher Anteil der Emissionen noch oxidiert und welcher Anteil bis zum Öffnen des Auslassventils bestehen bleibt.

Reaktionsmechanismen lassen sich im Wesentlichen in fünf Kategorien unterteilen, die sich vor allem hinsichtlich der Anzahl an Spezies und Reaktionen unterscheiden und nachfolgend mit abnehmendem Detaillierungsgrad beschrieben werden. Detaillierte Mechanismen versuchen alle wichtigen Elementarreaktionen und Einzelspezies zu beinhalten. Entsprechend hoch können die Anzahl an Spezies mit über 1000 bzw. die Anzahl der Reaktionen mit über 10 000 sein [42, 53]. Bei den konzentrierten (engl. lumped) Mechanismen werden Moleküle ähnlicher chemischer Verbindung gruppiert und als eine repräsentative Spezies behandelt. Reduzierte Mechanismen stellen Vereinfachungen von detaillierten Reaktionsmechanismen dar, bei denen durch Methoden wie Annahmen von Quasistationarität oder Sensitivitätsanalysen die Anzahl an Spezies bzw. Reaktionen reduziert wird [24]. Skelettmechanismen (engl. skeletal mechanism) fokussieren sich bei der Ableitung aus detaillierten Mechanismen auf einen bestimmten Anwendungsbereich, zum Beispiel die HCCI-Verbrennung [64], weshalb sich die Gültigkeit auf diesen beschränkt. Globale Reaktionsmechanismen stellen die Form mit der geringsten Anzahl an hinterlegten Spezies und Reaktionen dar. So wird die Oxidation unterschiedlicher Kohlenwasserstoffe in Flammen zum Beispiel in [67] durch lediglich eine Einschritt-Reaktionskinetik beschrieben. [73]

Detaillierte Mechanismen können mit ihrer Vielzahl an Spezies und Reaktionen ein breiteres Anwendungsspektrum abdecken. So beinhaltet der detaillierte Mechanismus [53, 55, 56] der CRECK Modeling Group des Politecnico di Milano neben einer Niedertemperatur- und einer Hochtemperaturoxidation auch die Ruß- und Stickoxidmodellierung. Jedoch geht mit dem hohen Detaillierungsgrad auch ein hoher Rechenaufwand einher. Für jede einzelne Spezies ist eine Differenzialgleichung zu lösen, weshalb die Rechenzeit ungefähr mit der dritten Potenz zur Anzahl an Spezies ansteigt [55].

Für die **HC-Reaktionskinetik** beim Dieselmotor spielt der Ausgangskohlenwasserstoff bzw. das Gemisch unterschiedlicher Kohlenwasserstoffe, welches Dieselkraftstoff repräsentieren soll, eine wichtige Rolle. Dieselkraftstoff besteht aus einer Vielzahl unterschiedlicher Kohlenwasserstoffe, die sich in der Anzahl an Kohlenstoffatomen und ihrer Untergruppen unterscheiden. In [10] werden detaillierte Analysen zur Zusammensetzung dreier unterschiedlicher, kommerziell erhältlicher Dieselkraftstoffe gezeigt. Die Analysen zeigen, dass es signifikante Unterschiede in den Anteilen der einzelnen Kohlenwasserstoffe innerhalb der untersuchten Dieselkraftstoffe Allen gibt. ist jedoch die Hauptzusammensetzung aus Aromaten, Cycloalkanen und n- bzw. iso-Alkanen gemein.

Um nicht jedes vorkommende Molekül des Dieselkraftstoffes reaktionskinetisch modellieren zu müssen, werden Dieselersatzkraftstoffe verwendet, die in ihren chemischen bzw. physikalischen Eigenschaften dem tatsächlichen Kraftstoff ähnlich sind. Entsprechend der jeweiligen

Anwendung sollte der Ersatzkraftstoff hinsichtlich einer bzw. beiden Eigenschaften echtem Dieselkraftstoff entsprechen. Hinsichtlich der Zündwilligkeit ist n-Heptan ein aus einer Komponente bestehender Ersatzkraftstoff, der aufgrund der ähnlichen Cetanzahl wie Dieselkraftstoff verwendet wird [33, 60, 72]. Aufgrund der unterschiedlichen Flüchtigkeit zwischen n-Heptan und echtem Dieselkraftstoff kann es jedoch zu Unterschieden bei der Simulation bezüglich der flüssigen Sprayeindringtiefe und der Verdampfung und folglich auch bei der Verbrennung kommen. Ein weiterer Unterschied ist, dass für n-Heptan ein H/C-Verhältnis von 2,29 vorliegt, was über dem von Dieselkraftstoff mit ungefähr 1,8 liegt [46]. Im Vergleich mit anderen Ersatzkraftstoffen gibt es jedoch für n-Heptan eine Vielzahl Reaktionsmechanismen, die über einen an weiten Anwendungsbereich anhand von experimentellen Untersuchungen validiert wurden. [10]

Eine Übersicht zu Dieselersatzkraftstoffen, die aus mehreren Komponenten bestehen, wird in [55] gezeigt. Ersatzkraftstoffe aus zwei Komponenten werden durch ein Gemisch aus einem n-Alkan, wie n-Heptan oder n-Dekan, und einem Aromaten, wie Toluen, Xylene oder α -Methylnaphthalin, definiert. Hierzu zählt der als IDEA-Kraftstoff bezeichnete Ersatzkraftstoff, welcher aus einem Gemisch aus 70 Vol.-% n-Dekan und 30 Vol.-% α -Methylnaphthalin besteht und dessen physikalische und chemische Eigenschaften Dieselkraftstoff ähneln [10]. Ein auf diesem Gemisch basierender Mechanismus wurde im Rahmen von CFD-Simulationen eingesetzt und zeigte hinsichtlich der Ruß- und Stickoxidemissionen gute Übereinstimmungen mit den Messungen [5].

Die bereits genannten Mechanismen bieten sich grundsätzlich zur reaktionskinetischen Modellierung der HC-Emissionen an. Mit Ausnahme des globalen Einschrittmechanismus [67] enthalten diese auch Reaktionsgleichungen zur Beschreibung der Bildung bzw. Oxidation von CO. In [67] wird über einen einfachen Zweischrittmechanismus für Kohlenwasserstoffe bereits die Bildung und Oxidation von CO beschrieben:

$$C_x H_y + \left(\frac{x}{2} + \frac{y}{4}\right) O_2 \to xCO + \frac{y}{2} H_2O$$
 (2.1)

$$CO + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow CO_2 \tag{2.2}$$

Ein Dreischritt-CO-Mechanismus, welcher die Bildung und die Oxidation von CO berücksichtigt, findet sich in [60] und ist in Abbildung 2.1 schematisch dargestellt. Die CO-Bildung wird dabei direkt an den Kraftstoffumsatz gekoppelt. Dies entstammt der Vorstellung, dass bei der Verbrennung jedes Kohlenstoffatom zunächst zu CO oxidiert. CO kann nachfolgend zu CO_2 mit OH entsprechend der Reaktion

$$CO + OH \leftrightarrow CO_2 + H \tag{2.3}$$

beziehungsweise mit O2 entsprechend der Reaktion

$$CO + O_2 \leftrightarrow CO_2 + O \tag{2.4}$$

oxidieren. Basis für den Dreischritt-CO-Mechanismus bildet dabei die Annahme eines partiellen Gleichgewichtes der Wasserstoffverbrennung. [60]


Abbildung 2.1: Dreischritt-Mechanismus zur Abbildung der CO-Bildung und CO-Oxidation [60]

Das in [54] vorgestellte quasidimensionale Verbrennungsmodell enthält eine CO-Modellierung für den verbrannten Bereich. Diese beruht auf drei unterschiedlichen chemischen Reaktionen, deren Kinetik ebenfalls durch die Annahme von partiellen Gleichgewichten berechnet wird. Neben Reaktion (2.3), die aufgrund starker Nichtlinearitäten dreimal verwendet wird, beinhaltet das Modell die Reaktionen (2.4) und (2.5).

$$CO + O + M \leftrightarrow CO_2 + M \tag{2.5}$$

Für den Anwendungsfall, dass nicht die CO-Bildung anhand eines Kohlenwasserstoffes, sondern lediglich die CO-Oxidation hin zu CO2 von Interesse ist, bieten sich sogenannte CO/H2-Synthesegasmechanismen an. Auf den Dieselmotor übertragen würden sich solche Mechanismen für lokale Bereiche anbieten, in denen CO, welches durch unvollständige oder unvollkommene Verbrennung bereits gebildet wurde, nachträglich oxidieren kann. Eine Übersicht zu bestehenden CO/H₂-Mechanismen findet sich in [52]. Die aufgezeigten Mechanismen bestehen aus 13 bis 16 Spezies und 30 bis 59 Reaktionen. Die Mechanismen wurden mit Ergebnissen unterschiedlicher experimenteller hinsichtlich Messungen Zündverzugszeiten, Flammengeschwindigkeiten Spezieskonzentrationen und miteinander verglichen und bewertet. Die experimentellen Messungen unterscheiden sich

15

dabei in den einzelnen Bereichen hinsichtlich Druck, Temperatur, stöchiometrischem Verhältnis und Verhältnis von CO zu H₂. [52]

2.3 Emissionsmodelle zur Abbildung der HC- und CO-Emissionen

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

In [49] wird ein in Matlab/Simulink implementiertes Modell vorgestellt, mit dem ein Marine-Dieselmotor basierend auf physikalischen, semiphysikalischen, mathematischen und thermodynamischen Gleichungen simuliert wird. Die Beschreibung des Modells soll sich dabei nachfolgend auf die Abbildung der HC- und CO-Emissionen beschränken, auch wenn das Modell umfassender ist.

Das HC-Modell in [49] berücksichtigt HC-Emissionen, die durch Ausmagern und Injektortröpfeln gebildet werden und anschließend teilweise oxidieren können. Die Menge an ausgemagerten Kraftstoff wird dabei über einen Faktor an die Gesamtmenge des eingespritzten Kraftstoffs während des Zündverzuges gekoppelt. Zusätzlich gelangt ein Teil des Kraftstoffes durch Injektortröpfeln in den Brennraum. HC aus beiden Quellen kann nachträglich durch einen empirischen Oxidationsmechanismus oxidieren.

Im CO-Modell aus [49] werden Emissionen aus der Premixed- und der Diffusionsverbrennung berücksichtigt. Der Anteil an CO, der aus der Premixed-Verbrennung entsteht, basiert dabei auf Gleichgewichtsannahmen für O, OH, O₂ und CO₂ [40] sowie den CO-Reaktionen (2.3) und (2.4). CO, welches durch die Diffusionsverbrennung gebildet wird, wird über einen Faktor an die Rußoxidation gekoppelt. [49] Im Mittel werden mit dem Modell die gemessenen HC- und CO-Emissionen für die durchgeführten Last- und Drehzahlsprünge gut wiedergegeben. Für die stationären Bedingungen zwischen den Last- und Drehzahlsprüngen liegen für die Messung jedoch deutliche Schwankungen der Emissionen vor, die von der Simulation nicht abgebildet werden. Inwieweit diese Abweichungen auf die Messung bzw. die Simulation zurückzuführen sind, wird allerdings nicht diskutiert. [49]

Ein quasidimensionales Modell zur Simulation von NO, Ruß und HC wird in [25] vorgestellt. In diesem wird der Einspritzstrahl in Pakete und Zonen unterteilt. Jede Zone wird dabei als ein offenes System behandelt, für das Massen-, Energie- und Speziesgleichungen gelöst werden. Das Modell berücksichtigt dabei HC-Emissionen aus drei Quellen: HC-Emissionen durch Ausmagerung, durch Wandeffekte und durch Injektortröpfeln. Als magere Zündgrenze wird ein Wert des Kraftstoffverhältnisses von $\phi_m = 0,2$ angenommen. Unverbrannter Kraftstoff, der sich außerhalb der Zündgrenze befindet, wird für die Emissionsberechnung berücksichtigt. Die lokale Kraftstoffkonzentration über den Sprayradius C(r) wird mit einem Ansatz aus [70] berechnet:

$$C(r) = C_c \left(1 - \left(\frac{r}{r_m}\right)^{1.5} \right) \tag{2.6}$$

Nach Gleichung (2.6) nimmt somit die Kraftstoffkonzentration ausgehend von der Sprayachse *Cc* zum Sprayrand ab. Eine nachträgliche thermische Oxidation des zunächst ausgemagerten Kraftstoffes wird im Modell berücksichtigt. Basierend auf der Annahme, dass in den sehr mageren Bereichen, die Variation der Sauerstoffkonzentration eher gering ist, findet eine Vereinfachung der HC-Reaktionsrate statt:

$$\frac{dm_{HC}}{dt} = -A \frac{m_{HC}^2}{V} exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right)$$
(2.7)

Bei der Berechnung des Kraftstoffes aus Wandeffekten findet in [25] keine Berechnung einer Wandzone statt, was dem Modellansatz nach Kaal [26] für die NO-Berechnung entsprechen würde. Stattdessen wird die Masse an unverbrannten Kraftstoff aus allen Zonen berechnet, die bei der Sprayausbreitung auf die Zylinderwand trifft (engl. overpenetrated fuel spray). [25]

$$m_{HC,op} = c_{op} \sum_{i=op}^{Zonen} m_{Krst,i}$$
(2.8)

In Gleichung (2.8) entspricht der Abstimmparameter c_{op} dem Anteil an Kraftstoff, der auf die Zylinderwand trifft und der unverbrannt den Brennraum verlässt. Für c_{op} wird dabei ein Wert von 0,02 angenommen. [25]

Als letzte Quelle werden im Modell HC-Emissionen durch Injektortröpfeln berücksichtigt. Hierfür wird in [25] ein Ansatz gewählt, wie er auch in [38] zu finden ist. Demnach tritt ein Teil des Kraftstoffes im Injektor aus dem Injektor aus und verbleibt als unverbrannter Kraftstoff. Für den Anteil des Kraftstoffes, der aus dem Injektor austritt, wird dabei ein Wert von 0,12 gewählt. [25]

Neben einem Vergleich der Ergebnisse des HC-Modells mit Messungen für eine Last- und eine Drehzahlvariation werden ebenso der Anteil der unterschiedlichen Quellen an den Gesamtemissionen für die Lastvariation gezeigt. Demnach nehmen für geringe Lasten vor allem HC-Emissionen durch Ausmagerung zu. HC-Emissionen aus Wandeffekten konnten nur im Bereich geringer Last festgestellt werden. Der prozentuale Anteil der HC-Emissionen durch Injektortröpfeln nimmt mit ansteigender Last zu und macht trotz der Verwendung einer Sitzlochdüse den Großteil der Emissionen im Modell ab einer Last von 80% aus. [25]

Eine weitere Veröffentlichung der Modellierung von HC und CO, aber auch von NO und Ruß für ein quasidimensionales Verbrennungsmodell findet sich in [54]. Die Modellierung der HC-Emissionen entspricht dabei im Wesentlichen der aus [25]. Es werden als Quellen der Emissionen Ausmagern, Wandeffekte und Injektortröpfeln modelliert. Der Anteil des Kraftstoffes, der durch Auftreffen auf die Brennraumwand als HC-Emissionen verbleibt und

durch den Parameter c_{op} festgelegt wird, wird mit einem Wert von 0,015 etwas geringer eingeschätzt als in [25]. [54]

Der Vergleich zwischen Simulations- und Messergebnissen erfolgt mittels sieben Betriebspunkten, wobei vier der Volllast mit Drehzahlen von 1500 bis 4000 U/min entsprechen und drei einer Last von 50% mit Drehzahlen von 1500 bis 3000 U/min. Wie bereits in [25] wird auch in [54] der Anteil der unterschiedlichen Emissionsquellen angegeben. Auch hier ist der Anteil der HC-Emissionen durch Ausmagern bei geringerer Last deutlich größer als bei Volllast. Ebenso ist der Anteil der HC-Emissionen durch Injektortröpfeln für Volllast größer als für 50% Last. HC-Emissionen durch Wandeffekte spielen bei 50% Last eine untergeordnete Rolle, sind jedoch die Hauptquelle der HC-Emissionen für den Betriebspunkt bei 1500 U/min und Volllast. Dass die Simulationsergebnisse aus [54] im Vergleich zu [25] einen höheren Einfluss des Wandeffektes zeigen, kann anhand der Motorspezifikationen abgeleitet werden. Mit einer Bohrung von 69,9 mm ist der in [54] gewählte Motor deutlich kleiner als der Motor in [25] mit einer Bohrung von 130 mm.

Das CO-Modell aus [54] beruht auf der bereits in Kapitel 2.2 vorgestellten Reaktionskinetik, die auf den drei Reaktionsgleichungen (2.3), (2.4) und (2.5) sowie Gleichgewichtsannahmen beruht. Durch die Verwendung des Multizonenansatzes für den Einspritzstrahl findet bereits eine Modellierung der Inhomogenitäten hinsichtlich des Luftverhältnisses beziehungsweise der Temperatur statt. Weitere Effekte, wie zum Beispiel ein expliziter Einfluss wandnaher Bereiche, werden nicht berücksichtigt. Übertragen auf die Quellen der CO-Emissionen werden somit primär CO aus lokal fetten Bereichen sowie CO durch Ausmagerung abgebildet. Ein Vergleich zwischen Simulation und Messung erfolgt anhand der gleichen Betriebspunkte wie für das HC-Modell. Da lediglich die Gesamtemissionen des CO-Modells dargestellt sind, lassen die Ergebnisse für diese Emissionen keinen Rückschluss auf die Quelle der Emissionen zu. [54]

In [50] werden für eine Vielzahl an Betriebspunkten Ergebnisse der Simulation mit Messergebnissen verglichen. Die Emissionsberechnung basiert hierbei auf einem nulldimensionalen stochastischen Reaktormodell (SRM). Dieses Modell wird hierbei auch für die Berechnung des Brennverlaufes verwendet. Das SRM betrachtet das Gasgemisch im Brennraum als ein Ensemble von fiktiven Partikeln, die sich miteinander vermischen und mit der Zylinderwand Wärme austauschen können. Jedes Partikel hat eine chemische Zusammensetzung, Temperatur und Masse. Diese Skalare werden durch eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF, engl. probability density function) beschrieben. Änderungen der PDF sind im Modell auf chemische Reaktionen, Wärmeverluste, Kolbenbewegungen, Kraftstoffeinspritzungen und turbulente Vermischungen zurückzuführen. Durch die im Modell verwendete tabellarische Reaktionschemie ergeben sich deutliche Einsparungen der Rechenzeit verglichen mit einer detaillierten Chemie. [50]

Die Ergebnisse des SRM (Sim) im Vergleich zu den gemessenen HC- und CO-Emissionen (Exp) sind in Abbildung 2.2 dargestellt. Der Abbildung ist zu entnehmen, dass nach dem aktuellen Stand die HC- und CO-Emissionen mit dem SRM ohne Berücksichtigung von lokalen Phänomenen nur unzureichend wiedergegeben werden können. Auffällig ist hierbei, dass für die HC-Berechnung im Modell deutliche Schwankungen vorhergesagt werden (vor allem für die ersten 140 Betriebspunkte), während die Messungen auf niedrigem Niveau nahezu konstant verharren. Für die CO-Berechnung liefert das SRM ebenso größere Abweichungen von teilweise mehreren 100%. Aus Abbildung 2.2 wird ebenso ersichtlich, dass das SRM CO-Konzentrationsspitzen bei einzelnen Betriebspunkten unzulänglich abbildet. Folglich kann nach dem aktuellen Stand auch der Einfluss energetischer Verluste durch HC- und CO-Emissionen nur unzureichend wiedergegeben werden.



Abbildung 2.2: Vergleich zwischen gemessenen und mit SRM simulierten HC- und CO-Emissionen [50]

2.4 Phänomenologische Modelle nach Kožuch und Kaal

In der Vergangenheit ist bei der Modellierung der Dieselemissionen ein Schwerpunkt bei den Stickoxiden zu finden, was sich an der Vielzahl an existierenden Modellen zeigt [21–23, 35]. Das Modell nach Kožuch kann dabei aufgrund der guten Vorhersagefähigkeit und des phänomenologischen Ansatzes als Stand der Technik bei diesen angesehen werden. Dieses Modell wurde von Kaal erweitert [26]. Da das entwickelte HC/CO-Modell auf den Modellen nach Kožuch und Kaal aufbaut, werden diese Modelle nachfolgend dargestellt.

Die Zustände innerhalb des Brennraums bei der dieselmotorischen Verbrennung sind von starken Inhomogenitäten, vor allem hinsichtlich der lokalen Temperatur sowie des lokalen Luftverhältnisses, geprägt. Die zentrale Gleichung der chemischen Reaktionskinetik zur Berechnung der Geschwindigkeitskonstanten bildet die Arrhenius Gleichung, benannt nach Svante Arrhenius [17]:

$$k = A \cdot exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \tag{2.9}$$

Nach Gleichung (2.9) liegt zwischen der Geschwindigkeitskonstanten einer chemischen Reaktion und der Reaktionstemperatur ein exponentieller Zusammenhang vor. Aufgrund dieser exponentiellen Abhängigkeit sind einzonige Modelle zur Emissionsmodellierung gänzlich ungeeignet. Das Emissionsmodell nach Kožuch, welches schematisch in Abbildung 2.3 dargestellt ist, versucht die Inhomogenitäten im Brennraum durch eine zweizonige Modellierung abzubilden. Für eine detaillierte Abbildung des Modells, die auch Enthalpie- und Wandwärmeströme enthält, sei auf [35] verwiesen.



Abbildung 2.3: Schematische Darstellung des Zweizonenmodells zur Stickoxid- und Rußberechnung nach Kožuch [35]

Das phänomenologische Emissionsmodell nach Kožuch teilt den Brennraum in eine kalte unverbrannte Zone und eine heiße verbrannte Zone auf. Beide Zonen sind durch eine infinitesimal dünne, masselose Flammenzone voneinander getrennt. Der Gesamtmassenstrom in die verbrannte Zone setzt sich aus zwei Massenströmen zusammen. Ein Massentransport erfolgt durch die Flammenzone, wobei die Verbrennung stöchiometrisch modelliert wird. Somit liegt eine Koppelung des Massenstroms mit dem Brennverlauf vor. Ein zweiter Massentransport erfolgt durch die Zumischung von der unverbrannten in die verbrannte Zone nach Gleichung (2.10). [35]

$$g = c_g \cdot \rho_{uvZ} \cdot u_{Turb,g} \cdot V_{vZ}^{2/3} \cdot Anz_D + c_{ga} \cdot \frac{dm_B}{d\varphi} \cdot 6 \cdot n$$
(2.10)

Die Zumischung besteht nach Gleichung (2.10) aus einem turbulenz- und einem brennverlaufsproportionalen Term. Die Berechnung der turbulenten Geschwindigkeit berechnet sich auf Basis eines k- ε -Modells. Da die thermische Stickoxidbildung erst ab relativ hohen Temperaturen einsetzt [1, 21], beschränkt sich die Stickoxidmodellierung auf die verbrannte Zone, wobei hierfür der Zeldovich-Mechanismus Anwendung findet. [35]

Eine Erweiterung des Modells nach Kožuch wurde von Kaal entwickelt [26, 28]. Diese Erweiterung umfasst zum einen den Einfluss durch lokal fette Bereiche, zum anderen den Einfluss durch unterschiedliche Zylinderwandtemperaturen auf die NO-Bildung. Im Modell nach Kožuch kommt es zu einer Überschätzung der Stickoxidemissionen, wenn der Motor in einem Bereich nahe der Stöchiometrie betrieben wird. Kaal erweiterte hierzu das Modell durch Einführung einer fetten Zone. Diese wird mit einer reduzierten Temperatur und einer unterstöchiometrischen Zusammensetzung modelliert, was zu einer reduzierten Stickoxidbildung im Modell führt. Der Anteil der fetten Zone wird dabei mittels Funktion des globalen Luftverhältnisses nach Gleichung (2.11) modelliert. [26]

$$a = -\cos(A \cdot \lambda \cdot \pi + P \cdot \pi) + 0 \tag{2.11}$$

Kaal zeigte außerdem einen Einfluss der Zylinderwandtemperaturen auf die Stickoxidemissionen, der bislang unzureichend berücksichtigt wurde. Hierfür wurde das Modell nach Kožuch um eine Randzone erweitert, in der aufgrund der geringeren Temperaturen im Bereich der Brennraumwände keine Stickoxidbildung stattfindet. Die Randdicke an Kolben, Laufbuchse und Zylinderkopf hängt von deren jeweiligen Temperaturen ab und wird nach Gleichung (2.12) berechnet. [26]

$$b_{NO} = F \cdot \left(\frac{T_{Wand}}{400 \, K}\right)^E + C \tag{2.12}$$

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

3 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen

In diesem Kapitel werden die wesentlichen Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen, die der Modellierung zugrunde liegen, dargestellt. Hierbei handelt es sich um jene Messungen eines Pkw-Dieselmotors, die im Rahmen eines Forschungsprojektes durchgeführt wurden und von Kaal zur Modellierung verwendet wurden [26, 27]. Auf diese Quellen wird im Wesentlichen für die Beschreibung des vermessenen Motors sowie der verwendeten Messgeräte zurückgegriffen. Im Anschluss werden die wichtigsten Messergebnisse hinsichtlich der HC- und CO-Emissionen dargestellt. Neben einer Übersicht der Emissionen im Kennfeld werden die Ergebnisse einer Variation der Brennraumwandtemperatur und des Luftverhältnisses dargestellt.

3.1 Daten des verwendeten Versuchsmotors

Die Messdaten zur Erstellung des HC/CO-Modells entstammen einem Motor der Daimler AG. Es handelt sich hierbei um eine modifizierte Euro 5 Variante des OM642, einem 3,0-1-V6-Dieselmotor mit einstufiger VTG-Abgasturboaufladung und Common-Rail Einspritzsystem. Im Wesentlichen unterscheidet sich der Versuchsmotor vom Serienmotor durch einen speziellen Kolben, der das Verdichtungsverhältnis reduziert. Eine Zusammenfassung der wichtigsten Kenngrößen des Motors zeigt Tabelle 3.1. [26]

Zylinderanzahl	6
Bauart	V-Motor
Bankwinkel	72°
Bohrung	83 mm
Hub	92 mm
Hubraum	2987 cm ³
Ventile / Zylinder	4
Verdichtungsverhältnis (thermodyn.)	Reduziert auf 14,3:1
Maximaler Einspritzdruck	1600 bar

Tabelle 3.1: Kenngrößen des vermessenen Motors OM642 [27, 66]

3.2 Messaufbau und Messgeräte

Der Motor wurde mit insgesamt 19 Temperatursensoren und 12 integralen Druckaufnahmestellen ausgestattet, wodurch eine vollständige Vermessung des Luftpfades an allen wichtigen Stellen gewährleistet ist. Jeder Zylinder wurde mit einer eigenen Hochdruckindizierung ausgestattet. Zudem befinden sich an jeder Zylinderbank Niederdruckindizierungen in der Mitte des Ladeluftverteilers beziehungsweise des Auslasskrümmers. In Abbildung 3.1 sind die wichtigsten Messstellen dargestellt. [27]



Abbildung 3.1: Aufbau und Messstellen des OM642 [27]

Für die Hochdruckindizierung wurden ungekühlte, piezoelektrische Hochdrucksensoren des Typs GU23D der Firma AVL verwendet, die zwischen den Auslassventilen platziert wurden. Für die Einlass- bzw. Auslassseite wurden piezoresistive Absolutdrucksensoren des Typs 4005BA5 bzw. 4045A der Firma Kistler verwendet. Um eine Beschädigung durch zu hohe Abgastemperaturen zu verhindern, besitzt der Sensor auf der Auslassseite einen Umschaltadapter. Für die Luftmassenmessung wurde ein Sensyflow Heißfilm-Anemometer der Firma ABB verwendet. Zur Erzeugung eines möglichst laminaren Luftstroms wurde ein entsprechend langes Beruhigungsrohr verwendet. Zur Bestimmung des Kraftstoffmassenstroms wurde eine Kraftstoffwaage vom Typ 733s der Firma AVL verwendet. [27]

Zur Abgasanalyse wurde eine gewöhnliche Abgasmessanlage verwendet, um die wichtigsten Abgaskomponenten zu bestimmen. Die gemessenen Komponenten des Abgases sowie das dazugehörige Messgerät sind in Tabelle 3.2 aufgelistet.

Tabelle 3.2: Gemessene Abgaskomponenten und verwendete Messgeräte

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

Da für diese Arbeit die Modellierung der HC- und CO-Emissionen im Vordergrund steht, beschränkt sich die Beschreibung der Messverfahren auf die wichtigsten Aspekte des FID und des NDIR. Zunächst soll das Verfahren zur Messung der HC mittels FID dargestellt werden. Im Abgas finden sich eine Vielzahl unterschiedlicher Kohlenwasserstoffverbindungen. Mit Hilfe eines FID lassen sich nicht die einzelnen Kohlenwasserstoffe nachweisen, sondern nur ein Summenergebnis dieser [63]. Das Messprinzip wird nachfolgend anhand von Abbildung 3.2 erklärt.



Abbildung 3.2: Flammenionisationsdetektor zur Messung der HC-Emissionen

Aus dem Abgas wird ein Teilmassenstrom entnommen und dem FID zugeführt. Für die Messung von Kohlenwasserstoffen im Abgas von Dieselmotoren ist es wichtig, die Abgasprobe zu beheizen, da es sonst zu einer Auskondensation von Kohlenwasserstoffen kommen kann, was zu einer fehlerhaften Messung führen würde. Zusammen mit dem Abgas werden synthetische Luft und ein Gasgemisch, welches Wasserstoff beinhaltet, in den FID geleitet, in dem eine Flamme in einem elektrischen Feld zwischen Anode und Kathode brennt. Dabei kommt es zu einer Ionisierung entsprechend Gleichung (3.1). [19, 63]

$$CH + 0 = CH0^+ + e^-$$
(3.1)

Hierbei liefert nach [19] nur eines von 10⁵ Kohlenstoffatomen ein Ion. Diese transportieren zwischen der Anode und Kathode einen Strom, der letztlich dem Messsignal entspricht. Kalibriert wird das Messgerät Mithilfe eines Nullgases, zum Beispiel Stickstoff, und eines Referenzgases, für das häufig Propan verwendet wird.

Mit Hilfe des NDIR erfolgt die Messung des CO im Abgas. Bei diesem Messverfahren wird die Eigenschaft von Gasen, Infrarot-Strahlung in einem charakteristischen Wellenlängenbereich zu absorbieren, genutzt. Das Messprinzip wird anhand von Abbildung 3.3 erklärt.



Abbildung 3.3: Nichtdispersiver Infrarot-Analysator zur Messung von CO und CO₂

Der NDIR besitzt eine zweigeteilte Messzelle, die von einer Infrarotquelle durchstrahlt wird. Ein Teil der Messzelle ist mit einem nicht absorbierenden Referenzgas, wie zum Beispiel Stickstoff, gefüllt. Der andere Teil wird vom Probengas durchströmt. Hierbei wird ein zur Konzentration des untersuchten Schadstoffes der Strahlungsenergie proportionaler Anteil im charakteristischen Wellenbereich des Schadstoffes absorbiert. Auf der gegenüberliegenden Seite der Infrarotquelle befindet sich der Detektor, der aus zwei Kammern besteht, die Proben des zu untersuchenden Schadstoffes enthalten und zum Beispiel mittels Membran voneinander getrennt sind. Durch die Differenz der ankommenden Strahlung kommt es zu einer unterschiedlichen Absorption in den beiden Kammern, die zu einem Druckunterschied zwischen den beiden Kammern führt. Die folgliche Auslenkung der Membran dient als Maß der Schadstoffkonzentration des Probengas. Durch eine rotierende Chopperscheibe wird die Infrarotstrahlung zyklisch unterbrochen, was zu einer wechselnden Auslenkung und somit zu einer Modulation des Sensorsignals führt. Aufgrund der Querempfindlichkeit gegenüber Wasserdampf wird das Probengas typischerweise getrocknet, bevor es den NDIR durchströmt. [19, 57]

3.3 Messungen bezüglich HC- und CO-Emissionen

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

3.3.1 Messung des Motorkennfeldes

Der in Kapitel 3.1 vorgestellte Prüfling wurde von Sosio im Rahmen eines abgeschlossenen Forschungsprojektes [27] an mehreren Kennfeldpunkten in einem Drehzahlbereich von 850 bis 3200 U/min vermessen. Die Messpunkte im Motorkennfeld sind in Abbildung 3.4 dargestellt.



Abbildung 3.4: Betriebspunkte der Kennfeldvermessung des Versuchsmotors OM642

Der Motor wurde mit einer, für den NEFZ typischen, Applikation hinsichtlich der Abgasrückführung (AGR) betrieben. Hierbei sei angemerkt, dass dieser

Zyklus zwar vom WLTC sowie RDE-Fahrten abgelöst wurde, jedoch zum Zeitpunkt der Messdurchführung dem aktuellen Prüfzyklus entsprach [27]. Im NEFZ relevanten Teillastbereich bei relativ niedrigen Drehzahlen sorgt diese Applikation mit hohen AGR-Raten für ein relativ geringes Luftverhältnis. Moderne Dieselmotoren, die die aktuelle Abgasnorm erfüllen, werden mit deutlich höheren AGR-Raten über größere Kennfeldbereiche betrieben als der zugrundeliegende Versuchsmotor. Grund hierfür ist das Ziel, die innermotorische Stickoxidbildung zu reduzieren.

Das gemessene Lambda-Kennfeld des Versuchsmotors ist in Abbildung 3.5 dargestellt. Hinsichtlich eines geringen Luftverhältnisses ist ein weiterer relevanter Betriebsbereich, der Bereich des Eckdrehmomentes, erkennbar. In diesem Bereich kommt es zu einer Gemischanfettung um das maximale Motordrehmoment zu erhöhen. Die Gemischanfettung wirkt sich auch positiv auf den Ladedruck des Abgasturboladers aus, da durch den höheren Abgasmassenstrom und die höhere Abgasenthalpie die Turbinenleistung gesteigert werden kann. [13]



Abbildung 3.5: Lambda-Kennfeld des Versuchsmotors OM642

Wie sich anhand der Arrhenius-Gleichung (2.9) ableiten lässt, ist die Brennraumtemperatur ein entscheidender Faktor für die Oxidation der HC-

und CO-Emissionen. Bei ausreichend hohen Temperaturen ist für magere Bereiche innerhalb des Brennraums mit einer ausreichend schnellen rechnen. Oxidationskinetik zu Als Referenzwert für die Oxidationsgeschwindigkeit in den unterschiedlichen Betriebspunkten ist in Abbildung 3.6 die maximale Massenmitteltemperatur im Motorkennfeld dargestellt. Hierbei sei darauf verwiesen, dass es sich hierbei nicht um gemessene Werte, sondern um Ergebnisse der Simulation handelt. Auch wenn es durch das inhomogene Brennverfahren beim Dieselmotor zu einer inhomogenen Temperaturverteilung innerhalb des Brennraumes kommt, so kann die maximale mittlere Brennraumtemperatur dennoch als Indikator für die Geschwindigkeit der Oxidationskinetik angesehen werden. Aus Abbildung 3.6 ist ersichtlich, dass es einen gewissen Zusammenhang zwischen der Motorlast und der maximalen Massenmitteltemperatur gibt. Dies ist im Wesentlichen auf den stärkeren Luftüberschuss im Niedriglastbereich zurückzuführen. Für die HC- und CO-Emissionen lässt sich daher schlussfolgern, dass eine reduzierte Reaktionskinetik als Quelle der Emissionen mit abfallender Last einen stärkeren Einfluss hat.



Abbildung 3.6: Maximale Massenmitteltemperatur im Kennfeld des Versuchsmotors OM642

Die gemessenen Emissionen – zunächst die HC-Emissionen – werden nachfolgend dargestellt und analysiert. In Abbildung 3.7 sind die gemessenen HC-Emissionen zum einen in der Einheit ppm dargestellt, zum anderen als Anteil der Kraftstoffenergie $x_{Krst,HC}$, der in diesen Emissionen gespeichert ist. Dieser Anteil berechnet sich unter Zuhilfenahme des unteren Heizwertes des Referenzgases Propan C₃H₈ nach Gleichung (3.2).

$$x_{Krst,HC} = \frac{(m_{HC,A\ddot{0}} - m_{HC,ES}) \cdot H_{u,C_3H_8}}{m_{Krst} \cdot H_{u,Krst}}$$
(3.2)

Abbildung 3.7 kann entnommen werden, dass im untersuchten Motorkennfeld primär ein Zusammenhang zwischen der Motorlast und den HC-Emissionen erkennbar ist. Während sich im hohen und mittleren Lastbereich die Emissionen auf einem niedrigen Niveau bewegen, ist im niedrigen Lastbereich ein deutlicher Anstieg mit abfallendem effektiven Mitteldruck erkennbar. Hinsichtlich der Tendenzen verhalten sich die beiden Darstellungen -Emissionen in ppm und Anteil der Kraftstoffenergie in den Emissionen - in Abbildung 3.7 ähnlich. Es treten somit vor allem in den Bereichen verstärkt HC-Emissionen auf, in denen die Reaktionskinetik durch geringere Brennraumtemperaturen verlangsamt ist. Für die HC-Emissionen hat die Gemischanfettung im Bereich des Eckdrehmomentes, siehe Abbildung 3.5, einen vernachlässigbaren Einfluss. In den Untersuchungen von [15] wird ein starker Anstieg der HC-Emissionen unterhalb eines kritischen Luftverhältnisses von $\lambda \approx 1.1$ angegeben, was in diesen Betriebspunkten unterschritten wird. Da es jedoch seit den Untersuchungen von [15] deutliche Weiterentwicklungen des Einspritzsystems, zum Beispiel des maximalen Einspritzdruckes [57], und damit der Gemischaufbereitung gab, ist eine Verschiebung dieses kritischen Luftverhältnisses hin zu geringeren globalen Luftverhältnissen zu erwarten.



Abbildung 3.7: oben: Gemessene HC-Emissionen im Kennfeld des Versuchsmotors OM642; unten: Anteil der Kraftstoffenergie in den HC-Emissionen

Eine zu den HC-Emissionen analoge Betrachtung der CO-Emissionen im Motorkennfeld ist in Abbildung 3.8 dargestellt. Die Berechnung des Anteils der Kraftstoffenergie in den CO-Emissionen $x_{Krst,CO}$, erfolgt entsprechend Gleichung (3.3) und somit analog zu den HC-Emissionen.

$$x_{Krst,CO} = \frac{(m_{CO,A\ddot{O}} - m_{CO,ES}) \cdot H_{u,CO}}{m_{Krst} \cdot H_{u,Krst}}$$
(3.3)

Bezüglich der Emissionen in ppm ist vor allem der Bereich des Eckdrehmomentes markant, in dem mit Abstand die höchsten Emissionskonzentrationen verzeichnet werden. In diesem Bereich liegen die geringsten Luftverhältnisse innerhalb des Kennfeldes vor. Dies führt zu größeren, lokal unterstöchiometrischen Bereichen, die für den Anstieg der Emissionen verantwortlich sind. Analog zu den HC-Emissionen lässt sich ein Anstieg hin zu niedrigen Lasten erkennen. Die Emissionen liegen zwar in der ppm-Betrachtung deutlich unter denen des Eckdrehmomentes, entsprechen jedoch einem ähnlichen Anteil der Kraftstoffenergie. Dies ist auf den höheren Luftüberschuss im Niedriglastbereich zurückzuführen. Im Bereich höherer Drehzahl und mittlerer bis hoher Last befinden sich die geringsten CO-Emissionen innerhalb des vermessenen Kennfeldes. Eine gute CO-Oxidation in diesen Bereichen kann auf ein ausreichend mageres Luftverhältnis sowie ausreichend hohen Brennraumtemperaturen zurückgeführt werden, wie aus Abbildung 3.5 und Abbildung 3.6 ersichtlich wird.



Abbildung 3.8: oben: Gemessene CO-Emissionen im Kennfeld des Versuchsmotors OM642; unten: Anteil der Kraftstoffenergie in den CO-Emissionen

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

3.3.2 Variation der Brennraumwandtemperatur

In den experimentellen Untersuchungen von [27] wurde auch eine Variation der Brennraumwandtemperatur durchgeführt. Die Variation der Wandtemperatur wurde dabei durch eine Veränderung der Kühlmittel- und Öltemperatur mittels externer Konditionierung realisiert. Die Randbedingungen der Variation sind in Tabelle 3.3 dargestellt.

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

Tabelle 3.3:Betriebsbedingungen der durchgeführten Variation der
Kühlmittel- und Öltemperatur

Für die Untersuchungen wurde die Kühlmitteltemperatur mittels externer Konditionierung in vier Schritten von 35 bis 80 °C variiert. Da der Motor über einen Öl-Kühlmittel-Wärmetauscher verfügt, besteht eine Kopplung der beiden Betriebsmitteltemperaturen. Dadurch ergibt sich eine Spreizung von unter 20 °C zwischen den beiden Temperaturen. Eine genauere tabellarische Übersicht der Kühlmittel- und Öltemperaturen zeigt Kaal in [26]. [27]

Eine direkte Wandtemperaturmessung fand im Rahmen der Untersuchungen von [27] nicht statt. Daher wurde von Kaal zur thermischen Modellierung der Brennraumwände ein FE-Wandtemperaturmodell verwendet, welches als Resultat Ergebnisse der Brennraumwandtemperatur des Zylinderkopfes, der Laufbuchse und des Kolbens liefert. Die mittlere Brennraumwandtemperatur sowie die gemessenen Emissionen sind in Abbildung 3.9 zu sehen. [26]



Abbildung 3.9: Gemessene HC- und CO-Emissionen für die Kühlmittelund Öltemperaturvariation in Abhängigkeit der mittleren Wandtemperatur

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

3.3.3 Variation des Luftverhältnisses

Eine weitere, im Rahmen von [27] durchgeführte Variation betrifft das Luftverhältnis. Die Randbedingungen dieser Variation sind in Tabelle 3.4 dargestellt. Bezüglich des indizierten Mitteldruckes und der Drehzahl lassen sich diese Betriebspunkte im Kennfeld dem Bereich des Eckdrehmomentes zuordnen.

Tabelle 3.4:	Betriebsbedingungen der durchgeführten Variation des
	Luftverhältnisses

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

Die Variation umfasst elf Betriebspunkte mit unterschiedlichen Luftverhältnissen. Die Variation des Luftverhältnisses wurde dabei mithilfe der Einspritzmasse realisiert, was die Spreizung des indizierten Mitteldruckes in Tabelle 3.4 erklärt. Die gemessenen HC- und CO-Emissionen sowie das Luftverhältnis der Betriebspunkte sind in Abbildung 3.10 zu sehen. Ein recht starker Einfluss des Luftverhältnisses in Bereichen nahe der Stöchiometrie liegt für die CO-Emissionen vor. Je näher sich das globale Luftverhältnis in Richtung Stöchiometrie bewegt, desto stärker ist der Anstieg der Emissionen. Die Variation stimmt mit den Ergebnissen der Kennfeldvermessung überein, bei der ebenso für die Betriebspunkte mit geringstem Luftverhältnis im Bereich des Eckdrehmomentes die höchsten CO-Emissionen detektiert wurden. Es lässt sich somit erkennen, dass durch das inhomogene Brennverfahren bereits bei einem überstöchiometrischen Betrieb lokal fette

Bereiche gebildet werden, aus denen CO nicht durch Vermischung mit mageren Bereichen zu CO₂ weiteroxidieren kann.



Abbildung 3.10: Gemessene HC- und CO-Emissionen für die Lambda-Variation

Für alle Betriebspunkte der Variation bewegen sich die HC-Emissionen auf niedrigem Niveau. Auch für einen stöchiometrischen Betrieb konnte kein Anstieg der gemessenen HC-Emissionen festgestellt werden. Lokal fette Bereiche, die es bei diesem Betrieb aufgrund der steigenden CO-Emissionen geben muss, sind somit für die Modellierung der HC-Emissionen nicht relevant. Die Temperaturen in den unterstöchiometrischen Bereichen sind folglich ausreichend, um die H-C-Verbindung aufzubrechen. Sollte es für den heutigen Stand der Dieselmotoren folglich noch ein kritisches Luftverhältnis geben, unterhalb dessen es zu einem sprunghaften Anstieg der HC-Emissionen kommt, so ist dieses seit den Untersuchungen aus [15] deutlich geringer geworden.

4 Modellierung der HC-Emissionen

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

4.1 Injektortröpfeln

Eine Quelle der HC-Emissionen, die modelliert wird, entstammt dem Injektortröpfeln. Wie bereits in Kapitel 2.1 erwähnt handelt es sich hierbei um Kraftstoff, der nach dem eigentlichen Einspritzevent aus dem Injektor austritt und durch unzureichende Gemischaufbereitung als unverbrannter Kraftstoff verbleibt. Die Modellierung dieser Emissionen erfolgt nach Gleichung (4.1) analog zu diversen anderen Modellen [25, 38, 54] und beinhaltet den Abstimmparameter $c_{HC,Inj}$. Das Injektorvolumen V_{Inj} bezeichnet dabei das zum Brennraum hin offene Injektorvolumen, das je nach Injektorart das Sacklochvolumen einschließt.

$$m_{HC,Inj} = c_{HC,Inj} \cdot \rho_{Krst} \cdot V_{Inj} \tag{4.1}$$

Geht man von einer üblicherweise nahezu konstanten Kraftstoffdichte aus, so handelt es sich hierbei folglich um eine Masse an HC, die unabhängig vom Motorbetrieb ist. Aus Gleichung (4.1) folgt, dass mit zunehmender Einspritzmasse der Kraftstoffanteil, der durch Injektortröpfeln in den Brennraum gelangt, abnimmt. Des Weiteren ergibt sich ein linearer Anstieg der HC-Emissionen mit dem Injektorvolumen. Solch ein linearer Anstieg stimmt prinzipiell mit den Ergebnissen aus [15] überein. Entsprechend ergeben sich Vorteile bei Sitzlochdüsen gegenüber Sacklochdüsen, da bei erstgenannten das zum Brennraum offene Volumen deutlich reduziert ist [45].

Für den Abstimmparameter $c_{HC,Inj}$ wird in [38] ein Wert von 0,12 verwendet. Dieser Wert wird auch in weiteren Quellen [25, 54] übernommen. Der in [38] geschätzte Wert für $c_{HC,Inj}$ von 0,21, der von einer Darstellung aus [15] abgeleitet wurde, entspricht dem höchsten in der Literatur gefundenen Wert und kann als ein Richtwert für plausible Maximalwerte von $c_{HC,Inj}$ angesehen werden.

4.2 Ausmagerungseinfluss

Im Folgenden wird die Modellierung von HC-Emissionen, die durch Ausmagerung entstehen, vorgestellt. Hierbei müssen zwei Aspekte berücksichtigt werden: Zum einen geht es zunächst darum einen Anteil des Kraftstoffes, der ausmagert, zu bestimmen. Zum anderen muss die Möglichkeit einer nachfolgend stattfindenden Oxidation modelliert werden. Exemplarisch kann hierfür eine teilweise ausgemagerte, frühe Voreinspritzung, die durch eine ausgeprägte Haupteinspritzung erfasst wird und nachoxidiert, genannt werden. Der Anteil, des Kraftstoffes, der zunächst ausmagert, wird direkt an die Einspritzung gekoppelt und wird nach Gleichung (4.2) berechnet.

$$f_{HC,Ausm} = \frac{c_{HC,Ausm} \cdot u_{Turb,g} \cdot Anz_D}{m_{tInj,i} \cdot exp\left(\frac{-E_A}{RT_{AIFT}}\right) \cdot 10^{12}}$$
(4.2)

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

Als mageres Kraftstoffverhältnis ϕ_m , ab dem für dieselmotorische Drücke und Temperaturen keine Verbrennung mehr erfolgt, wird in [15] ein Bereich von 0,1 bis 0,3 genannt. In den bereits vorgestellten Multizonenmodellen wird ein Wert von 0,2 verwendet [39, 54]. Für das HC-Modell wurde für ϕ_m ein Wert von 0,2 verwendet, was einem Luftverhältnis von 5,0 entspricht. Mit diesem Luftverhältnis wird eine adiabat isobare Flammentemperatur T_{AIFT} für die mageren Bereiche berechnet. Diese wird für die exponentielle Temperaturabhängigkeit entsprechend des Arrhenius-Ansatzes in Gleichung (4.2) verwendet. Hierdurch wird der Einfluss einer reduzierten Reaktionskinetik durch verringerte Temperaturen, wie sie zum Beispiel bei frühen Voreinspritzungen oder allgemein geringen Brennraumtemperaturen vorliegen, berücksichtigt. Als Aktivierungsenergie E_A wird in Gleichung (4.2) ein Wert von 77900 J/mol verwendet, was der Aktivierungsenergie für die HC-Oxidation in mageren Bereichen aus [25] entspricht.

Eine schematische Darstellung des Ausmagerungsmodells ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Der ausgemagerte Kraftstoff wird entsprechend den Volumenanteilen auf die unverbrannte und die verbrannte Zone aufgeteilt. Grundsätzlich finden sich für unterschiedliche Kohlenwasserstoffe vereinfachte Reaktionskinetiken in der Form nach Gleichung (4.3) in [67].

$$\frac{d[HC]}{dt} = -A \cdot exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) [HC]^m [O_2]^n \tag{4.3}$$

In [15] wurde eine Vereinfachung für die Oxidation der Kohlenwasserstoffe in den mageren Bereichen entwickelt, welche bereits in Kapitel 2.3 mit Gleichung (2.7)vorgestellt wurde. Da die Variation der Sauerstoffkonzentration in den mageren Bereichen nur wenig variiert, wurde diese Konzentration für die Berechnung der HC-Oxidation in [15] nicht berücksichtigt. Die Annahme nahezu einer konstanten Sauerstoffkonzentration in den mageren Bereichen kann für die Hochdruckphase eines Betriebspunktes als Näherung gelten. Liegen jedoch unterschiedliche stöchiometrische AGR-Raten vor, so kann es dennoch zu einer stärkeren Variation der Sauerstoffkonzentration in den mageren Bereichen kommen. Entsprechend wurde Gleichung (2.7) um einen Term erweitert, der die Sauerstoffkonzentration in der jeweiligen Zone zur Sauerstoffkonzentration in Luft $x_{O_2,Luft}$ ins Verhältnis setzt.

$$\frac{dm_{HC,Ox}}{dt} = -A \frac{m_{HC}^2}{V} exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \frac{x_{O_2}}{x_{O_2,Luft}}$$
(4.4)

Für Gleichung (4.4) wurden die Werte für A, und E_A aus [25] übernommen. Entsprechend dem Zweizonenmodell nach Kožuch werden die Volumen und Temperaturen der jeweiligen Zone für die Oxidationsgleichung verwendet. Ebenso findet ein Massentransport vom Unverbrannten in die verbrannte Zone analog zum Modell nach Kožuch statt. Somit kann Kraftstoff, der zunächst in die unverbrannte Zone ausmagert, durch Einmischung in die verbrannte Zone unter höheren Temperaturen oxidieren.



Abbildung 4.1: Schematische Darstellung des Ausmagerungsmodells

4.3 Wandzoneneinfluss

Als letztes Submodell wird der Einfluss der reduzierten Oxidationskinetik in der Nähe der Brennraumwände vorgestellt. In Kapitel 2.4 wurde der Randzonenansatz nach Kaal bereits betrachtet. Bei diesem wird ein Teil der verbrannten Zone einer Randzone zugeordnet, in der keine Stickoxidbildung stattfindet. Eine entsprechende, auf das HC-Modell übertragene, Modellvorstellung könnte wie folgt aussehen: Analog wird für das HC-Modell eine Randzonendicke in Abhängigkeit der Wandtemperatur berechnet. Der eingespritzte Kraftstoff wird entsprechend den Volumenverhältnissen auf eine Kernzone und eine Randzone aufgeteilt, wobei in letztgenannter keine Oxidation stattfindet. In der Modellentwicklung zeigte sich jedoch eine solche Wandzonenmodellierung als nicht zielführend. Als problematisch zeigten sich hierbei vor allem die Bereiche im Kennfeld bei hoher Last mit allgemein niedrigem Niveau an HC-Emissionen. Hier würden sich unrealistisch niedrige Randzonendicken ergeben, die deutlich unter den üblichen Dicken thermischer Grenzschichten liegen [8]. Auch wird über eine reine Berücksichtigung der Zylinderwandtemperatur nicht dem Brennraumzustand Rechnung getragen. Bei höheren Zylindertemperaturen ist mit einer schnelleren Oxidation des Kraftstoffes zu rechnen, bevor wesentliche Teile des Gemisches in den Randzonenbereich einmischen.

Der Aufbau der Wandzonenmodellierung ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Dieses Untermodell enthält einen Ansatz zur Oxidation des Kraftstoffes, einen Term zur Beschreibung der Randzonendicke sowie einen Ansatz zur Beschreibung der Einmischung in die Randzone. Zu Beginn der Einspritzung wird der Kraftstoff vollständig in eine Kernzone eingespritzt. Hierbei liegt die Modellvorstellung zugrunde, dass der Kraftstoff mit Austritt aus dem Injektor zunächst auf das heiße Gas im Inneren des Brennraums trifft. In dieser kann der Kraftstoff nach Gleichung (4.3) entsprechend eines Oxidationsansatzes aus [67] oxidieren. Hierbei wurden die Reaktionsparameter des Ersatzkraftstoffes n-Heptan verwendet, da dieser eine ähnliche Cetanzahl wie Dieselkraftstoff besitzt [10].

Analog zum NO-Modell wird eine Randzonendicke für wandnahe Bereiche definiert, in denen die Temperaturen für die HC-Oxidation zu gering sind. Die

Randzonendicke des HC-Modells b_{HC} wird dabei über den Abstimmparameter $c_{HC,RZ}$ entsprechend Gleichung (4.5) an die Randzonendicke des NO-Modells b_{NO} gekoppelt. Im Vergleich zu einer separaten Berechnung der HC-Randzonendicke mittels Gleichung (2.12) reduziert sich somit der Aufwand der Abstimmung auf einen Parameter.

$$b_{HC} = c_{HC,RZ} \cdot b_{NO} \tag{4.5}$$

Das Brennraumvolumen wird in der Modellvorstellung, wie auch in Abbildung 4.2 dargestellt, vereinfacht als zylindrisch angesehen. Somit kann mithilfe der Randzonendicke des Zylinderkopfes, der Laufbuchse und des Kolbens der Anteil des Randzonenvolumens am gesamten Brennraumvolumen x_{RZ} berechnet werden.



Abbildung 4.2: Schematische Darstellung des Wandzonenmodells

Mit Beginn der Einspritzung beginnt auch die Ausbreitung des Kraftstoffes in Richtung wandnaher Bereiche. Hierfür wird die sogenannte Randeinmischfunktion *bmi* (engl. boundary mixing in) mithilfe des Integrals aus Gleichung (4.6) berechnet. Die Berechnung findet dabei für jede Einspritzung einzeln statt.

$$bmi_{Inj,i} = \frac{\int m_{Inj,i} \cdot u_{Turb,g} \, d\varphi}{\sqrt{(s_P + h_{OT})^2 + \left(\frac{d}{2}\right)^2} m_{tInj,i}}$$
(4.6)

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

$$x_{mRZ_{Inj,i}} = bmi_{Inj,i} \cdot x_{RZ} \tag{4.7}$$

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

Basierend auf den drei in den Kapiteln 4.1 bis 4.3 vorgestellten Untermodellen lassen sich die gesamten HC-Emissionen unterschiedlichen Zonen zuordnen. Eine schematische Darstellung dieser Zonenaufteilung zeigt Abbildung 4.3. Hierbei sei erwähnt, dass das Injektortröpfeln eine volumenlose Masse ist und somit keine Zone im eigentlichen Sinne. HC-Emissionen aus dieser Quelle werden lediglich als Masse nach der letzten Einspritzung zu den Gesamtemissionen addiert.



Abbildung 4.3: Aufteilung der HC-Emissionen auf unterschiedliche Zonen

Das HC-Modell ist als Postprocessing-Modul entwickelt worden. Dies bedeutet, dass die Emissionsberechnung nach Abschluss der Arbeitsprozessrechnung durchgeführt wird. Eine Rückkopplung der Ergebnisse des **HC-Modells** auf den Umsetzungsgrad des Verbrennungsmodells ist somit nicht implementiert. Als Ausgabe liefert das Modell sowohl eine Konzentration bzw. Masse der Emissionen als auch den Anteil der über den Kraftstoff zugeführten Energie, die in den Emissionen gebunden ist und folglich ungenutzt bleibt.

4.4 Validierung des HC-Modells anhand des Versuchsmotors OM642

Das HC-Modell, mit den in den Kapiteln 4.1 bis 4.3 vorgestellten Untermodellen, besitzt insgesamt drei Abstimmparameter: Der Parameter $C_{HC,Inj}$ dient der Abstimmung der HC-Emissionen, die durch Injektortröpfeln entstehen. Mithilfe von $c_{HC,Ausm}$ erfolgt die Abstimmung der HC-Emissionen durch ausgemagerten Kraftstoff. Schließlich wird mit dem Parameter $c_{HC,RZ}$ durch Kopplung an das NO-Randzonenmodell eine HC-Randzonendicke für wandnahe Bereiche definiert, um HC-Emissionen durch Wandeffekte zu berücksichtigen. Zunächst werden die Gesamtergebnisse des abgestimmten Modells mit den Messungen der Betriebspunkte des Kennfeldes des
Versuchsmotors OM642 verglichen, was in Abbildung 4.4 dargestellt ist. Im Anschluss erfolgen weitere Untersuchungen zum Einfluss der einzelnen Untermodelle auf die Gesamtemissionen. Die Abstimmparameter, die den Ergebnissen aus Abbildung 4.4 zugrunde liegen, sind in Tabelle 4.1 dargestellt.

 Tabelle 4.1:
 Abstimmparameter des HC-Modells f
 ür den OM642

Abstimmparameter	Wert
CHC,Inj	0,120
CHC,Ausm	2,205
C _{HC,RZ}	0,297

Im gesamten Kennfeld zeigt das Modell eine gute Übereinstimmung mit den Messerergebnissen hinsichtlich der energetischen Betrachtung sowie der Betrachtung in ppm. Lediglich für Betriebspunkt 7 existiert eine etwas größere Abweichung zwischen Simulation und Messung. Ein Vergleich mit den Ergebnissen anderer Modelle [25, 50, 54] zeigt, dass auch bei detaillierterer Modellierung relative Abweichungen dieser Größenordnung in der Emissionsmodellierung vorkommen. Insgesamt beträgt die durchschnittliche Abweichung für die 43 Betriebspunkte 14 ppm bzw. 0,1% für die Kraftstoffenergie in den HC-Emissionen.

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



Abbildung 4.4: oben: HC-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: HC-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM642

Anhand von Abbildung 4.4 ließe sich vermuten, dass der Anstieg der HC-Emissionen hin zu geringen Lasten sowohl auf die geringere Wandtemperatur als auch auf den höheren Luftüberschuss rückführbar ist. Daher wurde eine erneute Abstimmung des HC-Modells vorgenommen, bei der jeweils ein Untermodell ausgeschaltet wurde. Ein Abstimmparameter wurde somit gleich 0 gesetzt, während eine erneute Optimierung der anderen Abstimmparameter durchgeführt wurde. Die Ergebnisse dieser Auswertung zeigt Abbildung 4.5.



Abbildung 4.5: Ergebnisse des HC-Modells ohne einzelne Untermodelle

Anhand von Abbildung 4.5 ist zu erkennen, dass für das Kennfeld des Versuchsmotors OM642 die Untermodelle Injektortröpfeln und Wandeinfluss eher eine untergeordnete Rolle spielen. Wird eines dieser Modelle ausgeschaltet, so ist der Anstieg der durchschnittlichen Abweichung gegenüber dem gesamten HC-Modell eher gering. Ohne Verwendung des Ausmagerungsmodells ergeben sich deutlich größere Abweichungen, weshalb diesem Untermodell die größte Bedeutung zugeschrieben werden kann. Die Ergebnisse stimmen somit mit dem Modell aus [25] überein, wonach der größte Anteil der HC-Emissionen durch Ausmagerungseffekte verursacht wird. Die zugrundeliegenden Betriebspunkte der Ergebnisse aus Abbildung 4.5 wurden im Kennfelddiagramm in Abbildung 3.4 dargestellt. Da sich die Betriebspunkte über einen weiten betriebsrelevanten Kennfeldbereich erstrecken und sowohl Niedrig- als auch Volllastpunkte berücksichtigt werden, kann die Bedeutung der einzelnen Untermodelle, wie sie aus Abbildung 4.5 folgt, für den Motorbetrieb insgesamt argumentativ begründet werden.

4.5 Validierung des HC-Modells anhand des Versuchsmotors OM646

An einem zweiten Motor wurde ebenso die Abstimmung des HC-Modells durchgeführt. Hierbei handelt es sich um einen Einzylinder-Versuchsmotor, der auf dem zugrundeliegenden Motor OM646 basiert. Die wichtigsten Kenngrößen des Motors sind in Tabelle 4.2 dargestellt. Die Messungen hierzu wurden im Rahmen des FVV-Projektes Nr. 1235 mit dem Titel "Emissionsmodellierung der dieselmotorischen Verbrennung mit variabler Ventilsteuerung" durchgeführt. Hierbei wurde für die Anwendung des HC-Modells allerdings nur der Betrieb mit mechanischer Ventilsteuerung berücksichtigt. Die Abstimmung erfolgte dabei an acht Punkten im Motorkennfeld, die in Abbildung 4.6 dargestellt sind. [50]

Tabelle 4.2:Kenngrößen des Einzylinder-Versuchsmotors basierend auf
dem OM646

Bohrung	88 mm
Hub	88,3 mm
Hubraum	537 cm ³
Ventile / Zylinder	4
Verdichtungsverhältnis (geom.)	Reduziert auf 15,88:1
Maximaler Einspritzdruck	2000 bar



Abbildung 4.6: Betriebspunkte im Kennfeld des Versuchsmotors OM646

An den acht Punkten im Kennfeld wurde der Motor mit unterschiedlichen Verbrennungsschwerpunkten bzw. unterschiedlichen AGR-Raten betrieben. Somit ergeben sich insgesamt 48 unterschiedliche Betriebsbedingungen des Motors. Die entsprechenden AGR-Raten bzw. die Verbrennungsschwerpunkte sind in Abbildung 4.7 dargestellt. Für detailliertere Informationen zu den Messungen sei auf das zugrundeliegende Projekt [50] verwiesen. Die entsprechenden Simulationsdaten zur innermotorischen Berechnung wurden von Yang bereitgestellt. Diese Daten umfassen neben durchgeführten Druckverlaufsanalysen auch ein abgestimmtes Verbrennungs- und Emissionsmodell, wobei hierbei das Modell nach Kožuch verwendet wurde [69]. Somit wurde bereits die verbrannte und unverbrannte Zone definiert, was die Gesamtabstimmung auf die Abstimmparameter des HC-Modells reduzierte.



Abbildung 4.7: AGR-Rate und Verbrennungsschwerpunkte der Betriebspunkte des OM646

Ein Vergleich des abgestimmten HC-Modells mit den Messdaten ist in Abbildung 4.8 zu sehen. Die Abstimmparameter für den zweiten Motor sind in Tabelle 4.3 aufgelistet. Es ist ersichtlich, dass auch für den zweiten untersuchten Motor das Modell die gemessenen Emissionen gut wiedergeben kann. Bei der Abstimmung zeigte sich, dass durch eine erneute Abstimmung des Wandzonenmodells mittels Parameter $C_{HC,RZ}$ keine wesentliche Verbesserung erzielt werden konnte. Die Ergebnisse aus Abbildung 4.8 für den OM646 enthalten somit den gleichen Wert des Abstimmparameters $C_{HC,RZ}$ wie für den OM642. Die Durchschnittliche Abweichung zwischen Simulation und Messung beträgt etwa 7 ppm beziehungsweise 0,04% der über den Kraftstoff zugeführten Energie. Das deutlich niedrigere Niveau hinsichtlich der Emissionen im Vergleich zu denen des OM642 lässt sich damit begründen, dass die Messpunkte eher dem mittleren Lastbereich zuzuordnen sind.



Abbildung 4.8: oben: HC-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: HC-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM646

Abstimmparameter	OM642	OM646	Gemittelt
C _{HC,Inj}	0,120	0,199	0,160
CHC,Ausm	2,205	0,842	1,524
C _{HC,RZ}	0,297	0,297	0,297

Tabelle 4.3:Individuelle Abstimmparameter des HC-Modells für den
OM642 und den OM646 sowie gemittelte Werte

Ein Vergleich der Abstimmparameter der beiden Motoren ist in Tabelle 4.3 zu sehen. Während für die Randzone der identische Wert verwendet wurde, gibt es größere relative Abweichung hinsichtlich der Parameter CHC, Ini und CHC, Ausm. Für letztgenannten ist der Wert für den OM642 um etwas mehr als den Faktor 2 größer. Grundsätzlich sind Unterschiede bei den Abstimmparametern für unterschiedliche Motoren nichts Ungewöhnliches, da sich in den Parametern letztlich Unterschiede des Einspritzsystems, der Brennraumgeometrie etc. widerspiegeln. Um dennoch die Auswirkungen von Abweichungen der individuellen Abstimmung auf das Gesamtergebnis innerhalb des HC-Modells abzuschätzen, wurde ein gemittelter Parametersatz aus den beiden untersuchten Motoren berechnet. Mit diesen, in Tabelle 4.3 dargestellten Werten, wurde nun erneut eine Simulation der beiden Motoren durchgeführt und mit den Ergebnissen der individuellen Abstimmung verglichen. Die Ergebnisse dazu sind in Abbildung 4.9 dargestellt. Für eine bessere Vergleichbarkeit der beiden Motoren wurde die Betrachtung hinsichtlich des Anteils der Kraftstoffenergie in den Emissionen herangezogen. Für die untersuchten 43 Betriebspunkte des OM642 bzw. den 48 Betriebspunkten des OM646 lag der Anteil von x_{Krst,HC} durchschnittlich bei 0,98% bzw. 0,32%. Es ist zu erkennen, dass auch mit einem gemittelten Parametersatz für beide Motoren weiterhin gute Ergebnisse mit dem Modell erzielt werden. Die durchschnittlichen Abweichungen liegen weiterhin deutlich unter den durchschnittlichen Werten der untersuchten Betriebspunkte. Die dargestellten Ergebnisse des mittleren Parametersatzes sprechen für die Modellfähigkeit. Des Weiteren empfiehlt sich, basierend auf den beiden untersuchten Motoren, die Verwendung der in Tabelle 4.3 aufgeführten mittleren Parameter als Standardwerte zu verwenden.



Abbildung 4.9: Abweichung für individuelle und gemittelte Parameter sowie durchschnittliche Kraftstoffenergie in HC-Emissionen für OM642 und OM646

5 Modellierung der CO-Emissionen

Analog zur Modellierung der HC-Emissionen wird, nachdem der Stand der Technik hinsichtlich der Quellen sowie Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen dargelegt wurden, in diesem Kapitel die Modellierung der **CO-Emissionen** vorgestellt. Das Modell beinhaltet einen CO-Oxidationsmechanismus mithilfe dessen CO aus zunächst unvollkommener bzw. unvollständiger Verbrennung nachträglich oxidieren kann. Außerdem beinhaltet das Modell die Auswirkungen durch lokal unterstöchiometrische Zonen, Ausmagerung und Brennraumwandeffekten. Zuletzt werden die Ergebnisse für die Abstimmung des CO-Modells anhand zweier unterschiedlicher Motoren vorgestellt.

5.1 CO-Oxidationsmechanismus

In diesem Kapitel wird die Entwicklung des CO-Oxidationsmechanismus erläutert. Dieser wird im Zweizonenmodell für die verbrannte Zone angewandt, um in dieser die reaktionskinetisch kontrollierte Oxidation von CO zu CO₂ abzubilden. Eine Anwendung des Oxidationsmechanismus auf die unverbrannte Zone wäre grundsätzlich möglich. Allerdings wird in [60] gezeigt, dass es unterhalb von 1200 K zu einem schnellen Einfrieren der Reaktionen kommt. Folglich wird selbst für dieselmotorisch typische Kompressionsendtemperaturen die Reaktionsgeschwindigkeit in der unverbrannten Zone zu gering sein, um einen merklichen Einfluss auf die CO-Konzentration zu haben. Das Vorgehen zur Entwicklung des CO-Oxidationsmechanismus wird nachfolgend anhand von Abbildung 5.1 erklärt.



Abbildung 5.1: Vorgehen zur Entwicklung eines Einschritt-Reaktionsmechanismus für die Oxidation von CO

Der in der Entwicklung des reduzierten CO-Oxidationsmechanismus zugrundeliegende Gedanke liegt darin, die Oxidationsgeschwindigkeit für CO, die sich aus einem detaillierten Mechanismus für unterschiedliche Randbedingungen ergibt, auf eine Einschritt-Reaktionsgleichung zu übertragen. Dabei werden Randbedingungen aus der verbrannten Zone definiert, in denen die CO-Oxidation kinetisch kontrolliert abläuft. Zudem wird ein reduzierter Reaktionsmechanismus, der die Oxidation von CO zu CO2 abbildet, definiert. Im Anschluss wird mithilfe eines detaillierten Mechanismus die CO-Oxidation - genauer gesagt der Verlauf der CO-Konzentration - für die unterschiedlichen Randbedingungen der verbrannten Zone berechnet. Mithilfe eines Optimierungsverfahrens wird nun die Geschwindigkeitskonstante des reduzierten Mechanismus bestimmt, bei der der CO-Verlauf des reduzierten Mechanismus bestmöglich mit dem des detaillierten Mechanismus übereinstimmt. Somit ergibt sich für eine Vielzahl unterschiedlicher Randbedingungen der verbrannten Zone eine optimale Geschwindigkeitskonstante des reduzierten Mechanismus. Im Anschluss wird anhand einer Regressionsanalyse eine geeignete mathematische Gleichung bestimmt, die die Geschwindigkeitskonstanten für die unterschiedlichen Randbedingungen abbilden kann.

Als detaillierter Reaktionsmechanismus dient der CO/H₂-Synthesegasmechanismus der CRECK Modeling Group des Politecnico di Milano [6, 11, 12]. Da lediglich die Oxidation von CO zu CO₂ von Interesse ist, kann auf die Verwendung eines Mechanismus, der langkettige Kohlenwasserstoffe enthält, verzichtet werden. Die CO-Chemie kann somit relativ exakt abgebildet werden, bei einer akzeptablen Rechenzeit.

Als nächstes wurden die Randbedingungen gewählt, für die der CO-Verlauf des reduzierten Mechanismus mit dem CO-Verlauf des detaillierten Mechanismus übereinstimmen soll. Entsprechend den Ergebnissen aus [60] und [44] wurde ein kinetisch relevanter Bereich zwischen 1200 und 1700 K festgelegt, in denen der reduzierte Mechanismus eine gute Übereinstimmung mit dem detaillierten Mechanismus haben sollte. Unterhalb dieser Spanne kommt es zu einem schnellen Einfrieren der Reaktionen, oberhalb der Spanne ist die Reaktion so schnell, dass für motorische Bedingungen quasi ein Gleichgewichtszustand herrscht. Für die genannte Temperaturspanne wurden nun die abgestimmten Simulationsdaten aus [27] für die Motorkennfeldpunkte aus Abbildung 3.4 verwendet, um die in diesem Temperaturbereich geltenden Randbedingungen für den Druck und das Luftverhältnis in der verbrannten Zone zu bestimmen. Um die Rechenzeit der anschließend durchgeführten Simulationen und Optimierungen zu reduzieren, wurde nur jeder zwanzigste Grad Kurbelwinkel innerhalb des Temperaturbereiches berücksichtigt. Die hierdurch entstandenen Zustände mit den entsprechenden Temperaturen, Drücken und Luftverhältnissen sind in Abbildung 5.2 dargestellt.



Abbildung 5.2: Zustände in der verbrannten Zone im Temperaturbereich 1200 bis 1700 K hinsichtlich Druck und Luftverhältnis im Kennfeld des OM642

Für alle Punkte aus Abbildung 5.2 wurde nun mithilfe eines homogenen, chemischen Reaktors der CO-Oxidationsverlauf berechnet. Als Randbedingung wurde das O-H-System zu Beginn der Rechnung in den Gleichgewichtszustand gesetzt. Zudem ist sämtlicher Kohlenstoff zu Beginn in CO gebunden. Die Atomverhältnisse wurden dabei entsprechend eines zugrundeliegenden Dieselkraftstoffes gewählt. Der exemplarische CO-Verlauf für den detaillierten Mechanismus (Polimi) für die zugrundeliegenden Punkte (1), (2) und (3) aus Abbildung 5.2 sind in Abbildung 5.3 dargestellt. Nun wird versucht, diesen Verlauf mit einem reduzierten Mechanismus, für den die Geschwindigkeitskonstante optimiert wird, abzubilden. Als Basis wurde dabei der CO-Mechanismus aus [67] entsprechend Gleichung (5.1) gewählt und leicht modifiziert, wodurch sich Gleichung (5.2) ergibt.

$$\frac{d[CO]}{dt} = A \cdot exp \left(\frac{-E_A}{RT}\right) [CO] [H_2 O]^{0.5} [O_2]^{0.25}$$
(5.1)

$$\frac{d[CO]}{dt} = k_{CO}(T, p, \lambda) [CO]^{1.25} [H_2 O]_{GG}^{0.5} [O_2]_{GG}^{0.25}$$
(5.2)

Für die Oxidationsgleichung wird die Gleichgewichtskonzentration für H₂O und O2 verwendet. Hierdurch wird das Differentialgleichungssystem auf die CO-Konzentration reduziert, was dem Grundgedanken einer geringen Rechenzeit entgegenkommt. Es zeigte sich, dass durch die Verwendung des Exponenten 1,25 für die CO-Konzentration der Verlauf besser wiedergegeben werden konnte als für den Standardwert von 1 aus [67]. Der CO-Verlauf des reduzierten Einschritt-Mechanismus für die drei exemplarischen Randbedingungen ist ebenso in Abbildung 5.3 dargestellt. Es ist gut zu erkennen, dass sich mit Gleichung (5.2) und einer optimierten Geschwindigkeitskonstanten der CO-Verlauf des detaillierten Mechanismus gut abbilden lässt.



Abbildung 5.3: Verlauf der CO-Oxidation für ausgewählte Bedingungen in der verbrannten Zone für den detaillierten und den reduzierten Mechanismus

Eine entsprechende Optimierung der Geschwindigkeitskonstanten wurde für alle Randbedingungen aus Abbildung 5.2 durchgeführt. Die

Geschwindigkeitskonstanten, die sich dadurch ergeben, zeigt Abbildung 5.4. Es ist ein Anstieg der Geschwindigkeitskonstanten vor allem mit steigender Temperatur, aber auch untergeordnet mit abfallendem Druck zu erkennen. Dies könnte mit einem Arrhenius-Ansatz entsprechend Gleichung (2.9) nur unzureichend abgebildet werden. Eine direkte Abhängigkeit vom Luftverhältnis ist nicht zu erkennen. Dies stimmt mit den Ergebnissen aus [60] überein, wonach der von der Kinetik dominierte Bereich für überstöchiometrische Luftverhältnisse kaum vom Luftverhältnis abhängt.



Abbildung 5.4: Optimierte Geschwindigkeitskonstante für reduzierten Mechanismus für unterschiedliche Bedingungen der verbrannten Zone

Mit Hilfe einer Regressionsanalyse wurde nun eine mathematische Gleichung bestimmt, die in Abhängigkeit der Randbedingungen Druck, Temperatur und Luftverhältnis die Geschwindigkeitskonstante gut wiedergeben kann. Hierbei wurden die Punkte mit dem reziproken Quadrat der Temperatur gewichtet. Hintergrund hierfür ist, dass durch fehlerhafte Oxidationsgeschwindigkeiten am unteren Ende des kinetisch dominierten Bereichs stärkere Auswirkungen auf das Gesamtergebnis zu erwarten sind. Zur Beschreibung der Geschwindigkeitskonstanten wurde Gleichung (5.3) gewählt, welche fünf Parameter und eine Abhängigkeit vom Druck und der Temperatur enthält.

$$k_{CO}(T,p) = C_1 \cdot exp(-exp(C_2 + C_3 \cdot T) \cdot p^{-C_4}) + C_5$$
(5.3)

Die Parameter, die sich aus der Regressionsanalyse ergeben, finden sich in Abbildung 5.5. Ebenso ist in Abbildung 5.5 die Geschwindigkeitskonstante in Abhängigkeit der Temperatur und des Druckes dargestellt. Die Regression ergab einen Wert des Bestimmtheitsmaßes von über 99%, was bestätigt, dass in Gleichung (5.3) auf die Abhängigkeit des Luftverhältnisses verzichtet werden kann.



Abbildung 5.5: links: Geschwindigkeitskonstante des reduzierten Mechanismus; rechts: Parameter zur Berechnung der Geschwindigkeitskonstante des reduzierten Mechanismus und Bestimmtheitsmaß

5.2 Luftmangeleinfluss

Als eine bedeutende Quelle der **CO-Emissionen** können lokal unterstöchiometrische Bereiche angesehen werden. Aufgrund der Inhomogenitäten des Dieselmotors diese bereits bei können überstöchiometrischem Betrieb auftreten, was aus dem Anstieg der CO-

Emissionen für die Messvariation in Kapitel 3.3.3 hervorgeht. Besonders im Kern der Einspritzung entstehen diese unterstöchiometrischen Bereiche, die dann allerdings im Verlauf der Hochdruckphase durch Vermischung mit mageren Bereichen abnehmen können. Entsprechend sollte das Untermodell zur Modellierung unterstöchiometrischer Bereiche sowohl die Bildung einer fetten Zone als auch die Abnahme dieser durch Vermischung mit magerenen Bereichen enthalten. Schematisch ist das Fettzonenmodell in Abbildung 5.6 dargestellt.



Abbildung 5.6: Schematische Darstellung des Fettzonenmodells

Zunächst wird der Anteil des Kraftstoffes, der bei der Einspritzung für die Bildung der fetten Zone verantwortlich ist, mittels der sogenannten Fettfunktion $f_{FZ,CO}$ entsprechend Gleichung (5.4) berechnet. $c_{f,CO}$ ist hierbei der Abstimmparameter zur Bildung der Fettzone. $x_{FL,m}$ ist der im Zylinder vorhandene modifizierte Frischluftanteil, der mittels Gleichung (5.5) berechnet wird. Entsprechend Gleichung (5.5) nimmt der Anteil der fetten Einspritzung mit zunehmender Einspritzdauer zu, da der modifizierte Frischluftanteil abnimmt.

$$f_{FZ,CO} = \frac{c_{f,CO}}{x_{FL,m}} \tag{5.4}$$

$$x_{FL,m} = x_{FL} - x_{Krst,uv} \cdot L_{st} \tag{5.5}$$

Der Anteil der fetten Einspritzung mischt sich mit der Zylinderluft entsprechend einer Mischung mit einem Luftverhältnis von $\lambda_{FZ} = 0,6$ und bildet somit einen Massenstrom in die fette Zone entsprechend Gleichung (5.6). Der Wert für λ_{FZ} wurde analog zum Luftverhältnis der fetten Zone der NO-Modellierung nach Kaal bzw. der Rußmodellierung nach Kožuch gewählt.

$$\frac{dm_{FZ,f}}{dt} = \frac{dm_{Inj}}{dt} \cdot f_{FZ,CO} \cdot (1 + (1 + x_{AGR,st}) \cdot \lambda_{FZ} \cdot L_{st})$$
(5.6)

Die Fettzone wird als eine Zone innerhalb der verbrannten Zone angesehen, ohne jedoch eine Rückwirkung auf die verbrannte Zone zu haben. Die Einmischung von CO aus der fetten Zone erfolgt über einen Massenstrom in die verbrannte Zone. Für die Spezieskonzentrationen in der Fettzone gelten Gleichgewichtsbedingungen und es wird die Temperatur der verbrannten Zone angesetzt. CO mischt entsprechend der Massenabnahme nach Gleichung (5.7) von der fetten in die verbrannte Zone. Gleichung (5.7) liegt dabei die Vorstellung einer kugelförmigen Fettzone zugrunde, deren Masse durch turbulenzgetriebene Einmischung magerer Bereiche abnimmt.

$$\frac{dm_{FZ,mix}}{dt} = c_{g,CO} \cdot \rho_{FZ} \cdot V_{FZ}^{\frac{2}{3}} \cdot u_{Turb,f} \cdot Anz_D \cdot f_{\lambda,Zyl}$$
(5.7)

Da die unterstöchiometrischen Bereiche lokal eher dem Kern der Einspritzung zugeordnet werden können, wird in Gleichung (5.7) die Einspritzturbulenz

 $u_{Turb,f}$ entsprechend [35] verwendet. In Gleichung (5.7) wird mittels Faktor $f_{\lambda,Zyl}$ der Einfluss des globalen Lambdas im Zylinder auf die Fetteinmischung berücksichtigt. Dieser Faktor berechnet sich nach Gleichung (5.8) und beschreibt, wie viel Masse des homogen angenommenen Zylinders mit der Masse der Fettzone vermischt werden muss, um ein stöchiometrisches Gemisch zu enthalten. Je geringer das globale Luftverhältnis im Zylinder, umso langsamer läuft folglich die Einmischung in die Fettzone ab. Der Bruchterm in Gleichung (5.8) wird dabei in der Berechnung auf einen unteren Wert von 0 begrenzt.

$$f_{\lambda,Zyl} = \frac{1 - \frac{1}{1 + L_{st} \cdot \lambda_{Zyl}} (1 + L_{st})}{\frac{1}{1 + L_{st} \cdot \lambda_{FZ}} (1 + L_{st}) - 1} + c_{FZ,mix}$$
(5.8)

Gleichung (5.8) beinhaltet den Parameter $c_{FZ,mix}$, da für ein stöchiometrisches bzw. unterstöchiometrisches Luftverhältnis im Zylinder keine Einmischung stattfinden würde. Jedoch werden durch Vermischung lokal fette Bereiche weniger fett, was zu einer Reduzierung der CO-Konzentration führt. Der Parameter $c_{FZ,mix}$ wurde im Modell zunächst auf den Wert 0,01 gesetzt und ist folglich nur für Betriebspunkte im Bereich der Stöchiometrie von Bedeutung. Der Verlauf von $f_{\lambda,Zyl}$ in Abhängigkeit des Luftverhältnisses im Zylinder ist in Abbildung 5.7 dargestellt.



Abbildung 5.7: Abhängigkeit des Faktors $f_{\lambda,Zyl}$ zur Berücksichtigung des Luftverhältnisses auf die Fetteinmischung

5.3 Ausmagerungseinfluss

Eine weitere Quelle der CO-Emissionen, die modelliert wird, ist analog zum HC-Modell der Einfluss ausgemagerter Bereiche. Die Modellierung des Ausmagerns für das CO-Modell ist hierbei ähnlich dem Ausmagern des HC-Modells aufgebaut. Zunächst wird für das CO-Modell die Annahme getroffen, dass sämtlicher eingespritzte Kraftstoff zu CO reagieren kann. Da der Anteil der Kraftstoffenergie in den HC-Emissionen auch bei niedrigen Lasten in einem einstelligen Prozentbereich liegt, siehe Abbildung 3.7, wird diese Annahme als zulässig akzeptiert. Der Anteil des ausmagernden CO berechnet sich mithilfe von Gleichung (5.9). Der Parameter c_{COAusm} dient dabei der Abstimmung. Für TAIFT wird ein Luftverhältnis von 2 zugrunde gelegt, was auf Ergebnissen aus [60] beruht. Demnach lag CO in mageren Bereichen mit einem stöchiometrischen Luftverhältnis von mindestens 2 vor. Es ergibt Sinn, dass dieser Wert unterhalb des Wertes für die HC-Ausmagerung liegt, da für die CO-Oxidation höhere Temperaturen benötigt werden. Für die Aktivierungstemperatur (E_A/R) wurde ein Wert von 9213 K gewählt, was dem Wert für die Aktivierungstemperatur der CO-Oxidation des Dreischritt-Mechanismus aus [43] entspricht.

$$f_{CO,Ausm} = \frac{c_{CO,Ausm} \cdot u_{turb,g} \cdot Anz_D}{m_{tInj,i} \cdot exp\left(\frac{-E_A}{RT_{AIFT}}\right) \cdot 10^{12}}$$
(5.9)

Die Verteilung des CO durch Ausmagerung erfolgt analog zum HC-Modell auf die unverbrannte und die verbrannte Zone entsprechend ihren Volumenverhältnissen. Wie bereits in Kapitel 5.1 erwähnt, beschränkt sich die nachträgliche CO-Oxidation auf die verbrannte Zone.

5.4 Wandzoneneinfluss

Als letztes Submodell wird der Einfluss einer reduzierten Oxidationskinetik in Nähe der Brennraumwände auf die CO-Emissionen vorgestellt. Wie bereits für die Modellierung des Ausmagerungseinflusses finden sich auch in diesem Submodell Ähnlichkeiten zwischen dem HC-Modell und dem CO-Modell. Eine Kopplung der CO-Randzonendicke b_{CO} an die NO-Randzonendicke b_{NO} erfolgt mithilfe des Abstimmparameters $c_{CO,RZ}$ nach Gleichung (5.10).

$$b_{CO} = c_{CO,RZ} \cdot b_{NO} \tag{5.10}$$

Die Berechnung der Randeinmischfunktion und der modifizierten Randzone erfolgt analog zum HC-Modell nach den Gleichungen (4.6) und (4.7) für jede Einspritzung einzeln. Für das CO-Modell wird nun allerdings eine Gewichtung der einzelnen Einspritzungen an der Gesamteinspritzmenge durchgeführt, womit sich der gewichtete modifizierte Gesamtrandzonenanteil x_{gmRZ} ergibt.

$$x_{gmRZ} = \sum_{i=1}^{n} \frac{m_{Inj,i} \cdot x_{mRZ,Inj,i}}{m_{tInj}}$$
(5.11)

Dieser Anteil teilt den Brennraum in einen Kernbereich und eine Randzone, in der keine CO-Oxidation stattfindet. Die Möglichkeit einer nachträglichen Oxidation von CO, welches aus der Randzone in die Kernzone mischt, ist im Modell implementiert. Die CO-Modellierung gleicht somit auch in diesem Fall der HC-Modellierung.

Analog zum HC-Modell lassen sich auch für das CO-Modell die gesamten CO-Emissionen unterschiedlichen Zonen zuordnen. Eine schematische Darstellung der Zonenaufteilung des CO-Modell zeigt Abbildung 5.8. Das CO-Modell wurde wie das HC-Modell als Postprocessing-Modul entworfen.



Abbildung 5.8: Aufteilung der CO-Emissionen auf unterschiedliche Zonen

5.5 Validierung des CO-Modells anhand des Versuchsmotors OM642

Das CO-Modell, mit dem in Kapitel 5.1 vorgestellten Oxidationsmechanismus sowie den in den Kapiteln 5.2 bis 5.4 vorgestellten Untermodellen, besitzt insgesamt vier Abstimmparameter: Der Parameter Cf.CO dient der Abstimmung der Bildung lokal unterstöchiometrischer Bereiche während cgCO deren Abnahme durch Einmischung abstimmt. Mit Hilfe von CCO,Ausm erfolgt die Abstimmung der CO-Emissionen durch ausgemagerte Bereiche, in denen die Verbrennungstemperatur für eine rasche Oxidation hin zu CO₂ zu gering ist. Schließlich wird mit dem Parameter c_{CO,RZ} durch Kopplung an das NO-Randzonenmodell eine CO-Randzonendicke für wandnahe Bereiche definiert, um CO-Emissionen durch Wandeffekte abzustimmen. Eine Abstimmung des in Kapitel 5.1 beschriebenen Oxidationsmechanismus ist nicht vorgesehen. Zunächst werden die Gesamtergebnisse des abgestimmten Modells mit den Messungen der Betriebspunkte des Kennfeldes des Versuchsmotors OM642 verglichen, was in Abbildung 5.9 dargestellt ist. Im Anschluss erfolgen weitere Untersuchungen zum Einfluss der einzelnen Untermodelle auf die Gesamtemissionen. Die Abstimmparameter, die den Ergebnissen aus Abbildung 5.9 zugrunde liegen, sind in Tabelle 5.1 dargestellt.

Abstimmparameter	Wert
Cf,CO	0,125
С _{g,} СО	0,220
C _{CO,RZ}	0,278
C _{CO,Ausm}	13,76

 Tabelle 5.1:
 Abstimmparameter des CO-Modells für den OM642

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



Abbildung 5.9: oben: CO-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: CO-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM642

Der Anstieg der CO-Emissionen im Modell im Bereich des Eckdrehmomentes kann eindeutig auf die Modellierung der Fettzone zurückgeführt werden. Anhand Abbildung 5.9 ließe sich vermuten, dass der Anstieg der CO- Emissionen hin zu geringen Lasten sowohl auf die geringere Wandtemperatur, als auch auf den höheren Luftüberschuss zurückzuführen ist. Daher wurde eine erneute Abstimmung des CO-Modells vorgenommen, bei der jeweils ein Untermodell ausgeschaltet wurde. Ein Abstimmparameter – für das Fettzonenmodell nur der Parameter c_{fCO} – wurde somit gleich 0 gesetzt, während eine erneute Optimierung der anderen Abstimmparameter durchgeführt wurde. Das Vorgehen entspricht somit dem bereits gezeigten für das HC-Modell. Die Ergebnisse dieser Auswertung zeigt Abbildung 5.10.



Abbildung 5.10: Ergebnisse des CO-Modells ohne einzelne Untermodelle

Während für das HC-Modell vor allem das Ausmagerungsmodell von Bedeutung ist, spielt für das CO-Modell neben dem Ausmagerungs- zusätzlich vor allem das Fettzonenmodell für eine exakte Abbildung der Emissionen über das Motorkennfeld eine wichtige Rolle. Hierbei sei allerdings erwähnt, dass die hohen Konzentrationen der Betriebspunkte 5 und 12 im Bereich des Eckdrehmomentes zu einer gewissen Verzerrung der Ergebnisse führt. Analog zum HC-Modell spielen die Wandeffekte eine eher untergeordnete Rolle. Eine Plausibilisierung der Bedeutung der einzelnen Untermodelle anhand der in Kapitel 2.3 vorgestellten CO-Modelle ist nicht möglich, da dort lediglich die Gesamtemissionen gezeigt werden. Eine Unterteilung, aus welchen Bereichen die Emissionen entstammen, wurde nicht gemacht.

5.6 Validierung des CO-Modells anhand des Versuchsmotors OM646

Analog zum HC-Modell wurde auch für das CO-Modell die Abstimmung mit dem OM646 an einem zweiten Motor durchgeführt. Die zugrundeliegenden Betriebspunkte sind die gleichen wie die, die in Kapitel 4.5 für das HC-Modell vorgestellt wurden. Die Ergebnisse des am OM646 abgestimmten CO-Modells, verglichen mit den Messungen, sind in Abbildung 5.11 zu sehen.

Es ist ersichtlich, dass auch für den zweiten untersuchten Motor das Modell die gemessenen Emissionen gut wiedergeben kann. Bei der Abstimmung zeigte sich, dass durch eine erneute Abstimmung des Wandzonenmodells mittels Parameter $c_{CO,RZ}$ keine wesentliche Verbesserung erzielt werden konnte. Diesbezüglich gleichen sich somit die Ergebnisse des CO-Modells mit denen des HC-Modells. Die Ergebnisse aus Abbildung 5.11 für den OM646 enthalten somit den gleichen Wert des Abstimmparameters c_{CO,RZ} wie für den OM642. Die Durchschnittliche Abweichung zwischen Simulation und Messung beträgt etwa 47 ppm beziehungsweise 0,04% der über den Kraftstoff zugeführten Energie. Das deutlich niedrigere Niveau hinsichtlich der Emissionen in beiden Betrachtungen aus Abbildung 5.11 im Vergleich zu denen des OM642 lässt sich damit begründen, dass die Messpunkte eher dem mittleren Lastbereich zuzuordnen sind. Zudem wird der Motor für alle Betriebspunkte mit einem Luftverhältnis größer als 1,3 betrieben, weshalb der Einfluss lokal unterstöchiometrischer Bereiche als gering angesehen werden kann.



Abbildung 5.11: oben: CO-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: CO-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM646

Die Abstimmparameter des OM646 sind in Tabelle 5.2 den Abstimmparametern des OM642 gegenübergestellt. Wie bereits erwähnt, konnte der Abstimmparameter des Randzonenmodells $c_{CO,RZ}$ übernommen

werden, ohne dass relevante Nachteile bei den Simulationsergebnissen in Kauf genommen werden mussten. Die relativen Unterschiede zwischen den Abstimmparametern der beiden Motoren fallen geringer aus als für das HC-Modell. Für den OM646 ist die Fettbildung, die Fetteinmischung sowie das Ausmagern geringer. Hierbei muss erwähnt werden, dass bei den untersuchten Motorbetriebspunkten des OM646 die Untermodelle zur Fettzone bzw. zur Ausmagerung noch nicht so dominant sind wie für die untersuchten Betriebspunkte des OM642.

Abstimmparameter	OM642	OM646	Gemittelt
C _{f,CO}	0,125	0,095	0,110
$\mathcal{C}_{g,CO}$	0,220	0,200	0,210
$\mathcal{C}_{CO,RZ}$	0,278	0,278	0,278
CCO,Ausm	13,76	8,254	11,01

Tabelle 5.2:Individuelle Abstimmparameter des CO-Modells für
OM642 und OM646 sowie gemittelte Werte

Um auch für das CO-Modell Abweichungen zur individuellen Abstimmung zu bestimmen, wurde ein gemittelter Parametersatz berechnet und mit diesem erneut eine Simulation der untersuchten Betriebspunkte der beiden Motoren durchgeführt. Dies entspricht dem bereits für das HC-Modell vorgestellte Vorgehen. Die Ergebnisse dazu sind in Abbildung 5.12 dargestellt. Für die untersuchten 43 Betriebspunkte des OM642 bzw. den 48 Betriebspunkten des OM646 lag der Anteil von $x_{Krst,CO}$ durchschnittlich bei 0,94% bzw. 0,25%. Auch für das CO-Modell ist zu erkennen, dass mit dem gemittelten Parametersatz – basierend auf den beiden untersuchten Motoren – eine gute Vorhersagefähigkeit der Emissionen gegeben ist. Analog zum HC-Modell empfiehlt sich daher die Verwendung der gemittelten Parameterwerte aus Tabelle 5.2 als Standardwerte.



Abbildung 5.12: Abweichung für individuelle und gemittelte Parameter sowie durchschnittliche Kraftstoffenergie in CO-Emissionen für OM642 und OM646

6 Qualitativer Vergleich des HC/CO-Modells

Nachdem die Ergebnisse des HC/CO-Modells für zwei unterschiedliche Motoren gezeigt wurde, bietet sich ein qualitativer Vergleich mit anderen Emissionsmodellen an. Die Emissionsmodelle [25, 49, 54], die in Kapitel 2.3 vorgestellt wurden, beinhalten einen Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Emissionen. In den Veröffentlichungen beschränkt sich der Vergleich jedoch auf nur sehr wenige Betriebspunkte. Aus diesem Grund wurde auf einen Vergleich dieser Modelle mit dem in dieser Arbeit entwickelten HC/CO-Modell mittels Bestimmtheitsmaß verzichtet. In [68] stellt Yang ein quasidimensionales Ladungsbewegungs- und Turbulenzmodell zur Vorhersage der Verbrennung und Emissionen bei Dieselmotoren vor. Zur Berechnung der NO- und Ruß-Emissionen werden hierbei die bereits vorgestellten Modelle [26, 35] verwendet. Die Auswertung umfasst dabei auch eine Regressionsanalyse, die deutlich mehr Betriebspunkte berücksichtigt als die in Kapitel 2.3 gezeigten Modelle. Mit Ruß und NO handelt es sich zwar um andere Emissionen, jedoch bietet sich der Vergleich an, da es sich hierbei um die gleiche Modellkategorie handelt. Darüber hinaus entsprechen die von Yang gezeigten Ergebnisse dem aktuellen Stand der Technik für die Ruß- und NO-Simulation in dieser Modellkategorie.

Eine Gegenüberstellung zwischen Messung und Simulation der HC- und CO-Emissionen für die beiden, in dieser Arbeit untersuchten, Motoren OM642 und OM646 ist in Abbildung 6.1 dargestellt. Die beiden Betriebspunkte 5 und 12 aus Abbildung 3.4 wurden in dieser Betrachtung nicht berücksichtigt, da ihre Absolutwerte deutlich außerhalb des Wertebereichs der anderen gemessenen CO-Emissionen liegen. Als Bestimmtheitsmaß R² ergibt sich für das HC-Modell ein Wert von 95,9% und für das CO-Modell ein Wert von 90,3%.



Abbildung 6.1: oben: Vergleich zwischen gemessenen und simulierten HC-Emissionen; unten: Vergleich zwischen gemessenen und simulierten CO-Emissionen

Als Ergebnis einer Regressionsanalyse unter Verwendung des neuen Ladungsund Turbulenzmodelles gibt Yang in [68] für das NO-Modell einen Wert für R² von 94,4% und für das Ruß-Modell einen Wert von 89,6% an. Das HC/CO-Modell bewegt sich bezüglich dieser Auswertung somit in einem ähnlichen Wertebereich. Es ist erkennbar, dass die Modellqualität bezüglich der HC- Emissionen mit den NO-Emissionen und bezüglich der CO-Emissionen mit den Ruß-Emissionen vergleichbar ist. Eine Erklärung hierfür findet sich in den Mechanismen, die für die jeweiligen Emissionen verantwortlich sind und in den Modellen berücksichtigt werden müssen: Kraftstoff wird mittels eines Injektors in den Brennraum eingespritzt und oxidiert nachfolgend. Das HC-Modell braucht somit keine Beschreibung der HC-Bildung, sondern es genügt lediglich die Beschreibung der HC-Oxidation. Wie bereits in Kapitel 2.1 erläutert, macht thermisches NO den mit Abstand größten Anteil der Stickoxide aus. Entsprechend reicht eine Beschränkung im NO-Modell auf die NO-Bildung aus den heißen, verbrannten Bereichen. Die Ruß- und CO-Modellierung beinhaltet dagegen sowohl eine Bildung als auch die anschließende Oxidation dieser Emissionen. Ruß, der während der Verbrennung gebildet wird, oxidiert zum größten Anteil noch im Brennraum. CO wird ebenso während der Verbrennung gebildet und stellt ein wichtiges Zwischenprodukt bei der Oxidation hin zu CO2 dar. Zwangsweise können hierdurch Abweichungen bei der Bildung und der Abnahme der Emissionen auftreten, was die geringeren Determinationskoeffizienten des Ruß- und CO-Modells erklärt.

7 Anwendung des Modells an einem virtuellen Versuchsträger

Nachdem in den vorangegangenen Kapiteln das HC/CO-Modell vorgestellt und eine Abschätzung der Güte gegeben wurde, wird in diesem Kapitel ein Anwendungsfall des Modells anhand eines virtuellen Versuchsträgers vorgestellt. Bei dem virtuellen Versuchsträger handelt es sich um ein am FKFS entwickeltes Simulationsmodell eines Dieselmotors, das den kompletten Luftpfad beinhaltet. Dieses ist wiederum in einem Fahrzeugmodell integriert, was unter anderem die Simulation unterschiedlicher Fahrzyklen bei unterschiedlichen Randbedingungen ermöglicht. Hierbei sei darauf verwiesen, dass den. hinsichtlich HCund CO-Emissionen. dargestellten Simulationsergebnissen keine Messungen zugrunde liegen, die eine Validierung ermöglichen würden. Die Intension dieses Kapitels liegt vielmehr darin, den Anwendern des Modells exemplarisch aufzuzeigen, wie das Modell den Motorentwicklungsprozess unterstützen kann. Die Betrachtung umfasst dabei neben der stationären Kennfeldsimulation auch einen Beschleunigungsvorgang im Rahmen einer RDE-Simulation.

Bei dem virtuellen Versuchsträger handelt es sich um ein 4-Zylinder-Dieselaggregat mit 2,0-l-Hubraum, Euro 6d fähigem Brennverfahren sowie einer kombinierten Hoch- und Niederdruck-AGR. Für die Simulation dieses Motors kann auf eine vollständige Applikation zurückgegriffen werden. Für diesen Motor, der in seiner grundlegenden Konfiguration den beiden für die Modellentwicklung und Validierung verwendeten Motoren ähnelt, wurde nun das HC/CO-Modell mit der Standardparametrierung angewandt. Zunächst soll hierbei auf die Ergebnisse des HC-Modells eingegangen werden. Hierzu sind die HC-Emissionen in ppm im Motorkennfeld in Abbildung 7.1 dargestellt.



Abbildung 7.1: HC-Emissionen im Motorkennfeld des virtuellen Versuchsträgers in ppm

Die Ergebnisse aus Abbildung 7.1 decken sich hinsichtlich der Tendenzen weitestgehend mit denen des OM642. Der virtuelle Versuchsträger besitzt mit 15,5 ein höheres Verdichtungsverhältnis, was basierend auf den Ergebnissen aus Kapitel 2.1 als ein wesentlicher Grund für das insgesamt niedrigere Emissionsniveau im Vergleich zum OM642 genannt werden kann. Neben den Gesamtemissionen gibt das Modell auch Aufschluss über die Aufteilung dieser auf die unterschiedlichen Modellzonen (vgl. Abbildung 4.3 und Abbildung 5.8). Hierzu werden die fünf gekennzeichneten Betriebspunkte aus Abbildung 7.1 näher untersucht. Diese liegen im Kennfeld bei einer Drehzahl von 2000 U/min sowie in einem Lastbereich von 5 bis 40%. Die Aufteilung der Emissionen zeigt Abbildung 7.2.


Abbildung 7.2: Aufteilung der HC-Emissionen bei 2000 U/min und unterschiedlicher Last für den virtuellen Versuchsträger

Aus Abbildung 7.2 wird ersichtlich, dass bei geringer Last der Effekt des Ausmagerns für den Hauptteil der Emissionen verantwortlich ist. Dies ist anhand der Emissionen in der unverbrannten bzw. der verbrannten Zone zu erkennen. Ab einer Last von 30% findet eine vollständige Einmischung der unverbrannten in die verbrannte Zone statt, weshalb sich keine Emissionen in der unverbrannten Zone befinden. Mit ansteigender Last kommt dem Injektortröpfeln eine größere Bedeutung zu. Hierbei sei jedoch darauf hingewiesen, dass die energetische Bedeutung der HC-Emissionen bei höherer Last abnimmt. So beträgt der energetische Kraftstoffanteil in den HC-Emissionen für den Betriebspunkt bei 40%-Last lediglich noch 0,2%. Für den betriebswarmen Motor spielen Emissionen aus der Randzone eine untergeordnete Rolle. Grundsätzlich werden im Zweizonenmodell nach Kožuch [35] bereits Wandwärmeverluste berücksichtigt. Die Verwendung der Randzone dient lediglich der Abdeckung solcher Effekte, die durch die zweizonige Beschreibung des Brennraumes noch nicht abgedeckt werden. Basierend auf diesen Ergebnissen ließen sich mit gezielten Strategien die HC-Emissionen reduzieren. Eine kurze Diskussion der entsprechenden Möglichkeiten erfolgt, nachdem eine analoge Betrachtung hinsichtlich der CO-Emissionen gezeigt wird.

Eine Übersicht bezüglich des Anteils der Kraftstoffenergie in den CO-Emissionen zeigt Abbildung 7.3. Der virtuelle Versuchsträger zeigt dabei Ähnlichkeiten zum bereits untersuchten OM642. Die größten Verluste treten zum einen im Bereich des Eckdrehmomentes und zum anderen bei geringer Last auf.



Abbildung 7.3: Verluste durch CO-Emissionen im Motorkennfeld des virtuellen Versuchsträgers in Prozent

Der virtuelle Versuchsträger wird im Bereich des Eckdrehmomentes verglichen mit dem OM642 mit einem etwas höheren Lambda betrieben, was zur Folge hat, dass die Verluste in diesem Bereich geringer als für den OM642 ausfallen. Analog zu den HC-Emissionen erklärt das höhere Verdichtungsverhältnis die geringeren Verluste im unteren Lastbereich. In Abbildung 7.4 erfolgt die Untersuchung der Emissionsaufteilung derselben Betriebspunkte bei 2000 U/min. Zusätzlich werden drei, in Abbildung 7.3 markierte, Betriebspunkte im Bereich des Eckdrehmomentes analysiert.



Abbildung 7.4: Aufteilung der CO-Emissionen bei Volllast und bei 2000 U/min und unterschiedlicher Last für den virtuellen Versuchsträger

Für die Betriebspunkte bei 100%-Last gibt das Modell an, dass nahezu alle CO-Emissionen aus lokal unterstöchiometrischen Bereichen entstammen. Für die Betriebspunkte bei 2000 U/min und unterschiedlicher Last zeigt das Modell an, dass zum Zeitpunkt AÖ die fette Zone komplett eingemischt wurde. Der große Anteil an Emissionen aus der unverbrannten und verbrannten Zone bei niedriger Last deutet an, dass auch für CO das Ausmagern der wesentliche Effekt ist. Bei einer Last von 40% gibt das Modell wandnahe Bereiche als dominierende Quelle an. Für diesen Betriebspunkt ist der Verlustanteil mit 0,1% der Kraftstoffenergie allerdings insgesamt sehr gering.

Mit den Modellergebnissen aus Abbildung 7.2 und Abbildung 7.4 als Grundlage könnten nun Strategien abgeleitet werden, um die HC- und CO-Emissionen zu reduzieren. Da bei Verbrennungsmotoren Maßnahmen zur Reduzierung einer Größe häufig im Zielkonflikt zu einer anderen Größe stehen, müssen die entsprechenden Veränderungen stets individuell und ganzheitlich betrachtet werden. Aufgrund der Vielzahl an Applikationsparametern und Technologien, die für Dieselmotoren heutzutage verfügbar sind, können im Folgenden nur mögliche Ansatzpunkte zur Emissionsreduzierung genannt werden. Diese beruhen auf den in Kapitel 2.1 vorgestellten Einflussfaktoren.

Im Bereich des Eckdrehmomentes stellt eine Verschiebung des Luftverhältnisses in Richtung mager einen großen Hebel zur Reduzierung der CO-Emissionen aus lokal fetten Bereichen dar. Da der Motor in diesem Bereich bereits ohne externe AGR betrieben wird, entfällt eine Veränderung dieser Größe als möglicher Ansatzpunkt. Eine Erhöhung des Luftverhältnisses über eine Reduzierung der Einspritzmenge würde zu einer verringerten Last und somit verringerten Leistung in diesem Bereich führen. Alternativ könnte über einen höheren Ladedruck und folglich mehr Frischluft ein etwas magererer Zustand im Brennraum herbeigeführt werden. Die Verwendung eines anderen Turboladers bzw. eines zusätzlichen elektrischen Verdichters muss dabei stets unter techno-ökonomischen Gesichtspunkten abgewogen werden.

Im Bereich niedriger Last treten sowohl HC- als auch CO-Emissionen auf. Aus Abbildung 7.2 und Abbildung 7.4 ging anhand der Emissionsaufteilung des Modells auf unterschiedliche Zonen hervor, dass Ausmagern die wesentliche Emissionsquelle ist. Beide Emissionen lassen sich bei dieser Ursache mit ähnlichen Maßnahmen reduzieren. Die Emissionsreduzierung kann hierbei zum einen bei der Entstehung der ausmagernden Spraybereiche als auch bei der besseren Oxidation dieser Bereiche ansetzen. Ein geringerer Zündverzug wäre als ein möglicher Ansatzpunkt zu nennen, um ausmagernde Spraybereiche zu verringern. Da die Brennraumtemperatur hierfür eine determinierende Größe ist, wäre eine Verschiebung der Voreinspritzungen in Richtung ZOT ein möglicher Ansatz. Durch eine Erhöhung Einlasstemperatur ließe sich ebenso eine HC- und CO-Reduzierung erzielen. Eine weitere Möglichkeit diese Emissionsquelle zu vermeiden würde die Lastpunktanhebung darstellen. Ein geringer Hybridisierungsgrad – gering, da Ausmagern nur in einem sehr geringen Lastbereich auftritt - verbunden mit der passenden Betriebsstrategie könnte diese Emissionsquelle wesentlich reduzieren.

Durch die Reduzierung des Brennraumes auf wenige Zonen sowie der Verwendung von Einschritt-Reaktionsmechanismen eignet sich das HC/CO-Modell nicht nur für die Untersuchung von stationären, sondern auch von transienten Betriebszuständen. Durch Messungen im realen Fahrbetrieb, verbunden mit deutlich dynamischeren Fahrbedingungen, ist es unerlässlich Kenntnisse des Motorverhaltens im transienten Betrieb bereits in einem frühen Entwicklungsprozess zu erlangen. Exemplarisch wird hierfür im Nachfolgenden Anwendung Modells für die des einen Beschleunigungsvorgang im Rahmen einer RDE-Simulation gezeigt. Bei diesem wird ein Referenzfahrzeug über eine Dauer von 12 s ohne Gangwechsel von 52 auf 66 km/h beschleunigt. Die Verläufe der Motordrehzahl und des effektiven Mitteldruckes dieses Beschleunigungsvorganges sind in Abbildung 7.5 dargestellt.



Abbildung 7.5: Motordrehzahl und effektiver Mitteldruck für einen Beschleunigungsvorgang einer RDE-Simulation

In Abbildung 7.6 sind für diesen Vorgang die HC- und CO-Emissionen eines Zylinders bei AÖ abgebildet. Die Emissionen sind zum einen für eine rein stationäre und zum anderen für eine transiente Betrachtung dargestellt. Die stationäre Betrachtung geht davon aus, dass es keinerlei transiente Effekte auf die Emissionen gibt und diese anhand der Drehzahl und des effektiven Mitteldruckes aus einem Kennfeld – wie in Abbildung 7.1 oder Abbildung 7.3 dargestellt ist – abgelesen werden können. Die transiente Betrachtung berücksichtigt dagegen den Einfluss dynamischer Effekte mit Hilfe des

Modells auf die HC- und CO-Emissionen. Aus Abbildung 7.6 geht hervor, dass sich für diesen Beschleunigungsvorgang die HC-Emissionen aus stationärer und transienter Betrachtung nur wenig unterscheiden. Deutliche Unterschiede ergeben sich für die CO-Emissionen nach einer Zeit von ca. 8 s. Hier ist ein deutlicher Anstieg der CO-Emissionen für die transiente Simulation zu erkennen. Dieser Anstieg der CO-Emissionen wird nachfolgend genauer untersucht.



Abbildung 7.6: Vergleich von HC- und CO-Emissionen für stationäre bzw. transiente Betrachtung

Wie bereits für die stationären Betriebspunkte lassen sich auch für transiente Simulationen die Emissionen den unterschiedlichen Zonen zuordnen. Dies ermöglicht dem Anwender über gesamte Fahrzyklen Kenntnisse über Emissionsursachen zu erlangen und geeignete Reduktionsmaßnahmen vorzunehmen. Eine Aufteilung der CO-Emissionen auf die unterschiedlichen Zonen für den gezeigten Beschleunigungsvorgang für die stationäre und die transiente Betrachtung ist in Abbildung 7.7 dargestellt. Hieraus geht hervor, dass die Entstehung von CO aus lokal unterstöchiometrischen Bereichen der primäre Grund für den Emissionsanstieg nach ca. 8 s ist. Das Modell gibt an, dass für die transiente Betrachtung bei AÖ noch lokal fette Zonen vorhanden sind, während diese bei der stationären Betrachtung vollständig eingemischt wurden. Somit hilft das Modell kritische Betriebszustände, wie sie im dynamischen Fahrbetrieb vorkommen, zu erkennen. Ähnlich den in Abbildung 7.4 analysierten Betriebspunkten ließen sich auf Basis der Ergebnisse aus Abbildung 7.7 nun Strategien ableiten, um Emissionen aus lokal unterstöchiometrischen Bereichen zu reduzieren.



Abbildung 7.7: oben: Aufteilung der CO-Emissionen für transiente Betrachtung; unten: Aufteilung der CO-Emissionen für stationäre Betrachtung

8 Zusammenfassung und Ausblick

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

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

Das HC/CO-Modell wurde an zwei unterschiedlichen Pkw-Dieselmotoren abgestimmt. Ein Vergleich zwischen Mess- und Simulationsergebnissen zeigt, dass unterschiedliche Effekte mit dem Modell gut wiedergegeben werden können. Für eine Gesamtbetrachtung des Kennfeldes ist für das HC-Modell dem Ausmagerungsmodell die größte Bedeutung zuzuschreiben, für das CO-Modell dem Ausmagerungs- und dem Fettzonenmodell. Die Abstimmung

anhand des zweiten Versuchsmotors zeigte, dass eine separate Abstimmung der Wandzonendicke nur unwesentliche Verbesserungen der Modellergebnisse mit sich bringt. Für eine Anwendung des Modells empfiehlt es sich folglich, die Standardwerte der Randzonenabstimmung zu verwenden bzw. dieses Submodell zuletzt abzustimmen. Ein Vergleich mit Ruß- bzw. NO-Simulationsergebnissen zeigt, dass das HC/CO-Modell eine ähnlich gute Modellgüte besitzt. Das HC/CO-Modell liefert neben einer Aussage zu den Gesamtemissionen eine Aufteilung dieser Emissionen auf unterschiedliche Zonen. Anhand eines virtuellen Versuchsträgers unter stationären und transienten Bedingungen wird exemplarisch gezeigt, wie das Modell den Entwicklungsprozess hin zu einem emissionsarmen Motor unterstützen kann.

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

Bei den beiden verwendeten Versuchsträgern handelt es sich um unterschiedliche Pkw-Dieselmotoren des gleichen Herstellers. Entsprechend muss davon ausgegangen werden, dass das Modell die Emissionen für zwei ähnliche Motoren gut abbilden kann. Inwieweit das Modell auch für andere Motorbauarten, zum Beispiel im Heavy-Duty-Bereich, ähnlich qualitative Ergebnisse liefert, muss noch untersucht werden. Gerade in diesem Bereich ist ein Zielkonflikt zwischen Kraftstoff- und AdBlue-Verbrauch Stand der Technik. Mittels höheren AGR-Raten kann über die reduzierte Stickoxidbildung der AdBlue-Verbrauch reduziert werden, was allerdings höhere HC- und CO-Emissionen zur Folge hat. Dieser Zielkonflikt lässt sich mit dem neuen HC/CO-Modell abbilden. Bei Motoren mit größerem Hubvolumen ist mit einer veränderten Bedeutung einzelner Effekte zu rechnen. So sollte ein geringerer Wandeffekt zu erwarten sein. Des Weiteren bleibt den Emissionen bei langsamlaufenden Dieselmotoren mehr Zeit für die Oxidation innerhalb des Brennraums, was zu einer steigenden Bedeutung der Reaktionskinetiken innerhalb des Modelles führt. Daher würde sich eine Validierung anhand weiterer Motorbauarten anbieten.

Eine Übertragung und Erweiterung des Modells auf weitere Brennverfahren, wie zum Beispiel dem Dual-Fuel-Betrieb, würde sich anbieten. Bei diesem kann ein Teil des Dieselkraftstoffes durch zum Beispiel komprimiertes Erdgas (CNG, engl. Compressed Natural Gas) ersetzt werden. Durch das bessere Verhältnis von Wasserstoff zu Kohlenstoff von CNG im Vergleich zu Dieselkraftstoff ergeben sich geringere CO2-Emissionen im Dual-Fuel-Betrieb. Untersuchungen hinsichtlich der Dieselverbrennung auf homogenem Grundgemisch wurden bereits in [65] durchgeführt. Eine Übertragung des HC/CO-Modells auf die durch die Dieseleinspritzung verursachten Emissionen innerhalb des Dual-Fuel-Betriebs erscheint grundsätzlich denkbar. Auch im Dual-Fuel-Betrieb können Ausmagerungs- und Wandeffekte der Einspritzung auftreten. Ebenso können im Einspritzkern lokal unterstöchiometrische Bereiche entstehen. Zusätzliche Emissionen können durch das homogene Grundgemisch im Bereich der Zylinderwände verursacht werden. Des Weiteren kann es bei einem sehr mageren Grundgemisch verstärkt zu Ausmagerungseffekten kommen. Die Verwendung des HC/CO-Modells für einen Dual-Fuel-Motor würde die Möglichkeit bieten, das Modell anhand weiterer Motordaten zu validieren und außerdem eine Modellerweiterung durchzuführen.

Eine vielversprechende Möglichkeit, um Treibhausgasemissionen des Transportsektors zukünftig zu reduzieren, bietet sich durch die Verwendung von synthetischen Kraftstoffen. Wird die zur Kraftstofferzeugung benötigte elektrische Energie aus regenerativen Quellen bereitgestellt, ist eine neutrale Verwendung hinsichtlich einer CO₂-Gesamtbilanzierung in konventionellen Antrieben möglich. Für den Einsatz in Dieselmotoren zeigen hierbei Oxymethylenether (OME) ein hohes Potential [48, 59]. Bei diesem Kraftstoff keine existieren auf molekularer Ebene Kohlenstoff-Kohlenstoff-Verbindungen, was eine praktisch rußfreie Verbrennung zur Folge hat. Messungen [20, 59] bestätigen, dass mit OME der sonst existierende Ruß-NOx-Zielkonflikt bei Dieselmotoren aufgehoben werden kann. Hierdurch ermöglichen sich neue Konzepte und Strategien zur Emissionsreduzierung. Durch Applikation höherer AGR-Raten zur NOx-Reduzierung im mageren Betrieb in Kombination mit einem Dreiwegekatalysator wurde in [47] gezeigt, dass sich die aktuelle Abgasnorm einhalten ließe. Dies gilt ebenso für den stöchiometrischen Motorbetrieb, wobei hierbei allerdings in [47] ein Anstieg bei den HC- und CO-Emissionen zu erkennen ist. Die genaue Kenntnis dieser Emissionen ist somit für eine exakte energetische Betrachtung dieses Betriebskonzeptes von Bedeutung. Das in dieser Arbeit entwickelte HC/CO-Modell kann hierbei helfen, präziser das Potential zukünftiger Kraftstoffe und Betriebsstrategien zu identifizieren.

Literaturverzeichnis

- Alberti P (2010) Von der Gemischbildung zu den Schadstoffemissionen im Dieselmotor auf direktem Weg. Dissertation, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg
- [2] Alkidas AC, Cole RM (1983) Gaseous and Particulate Emissions from a Single - Cylinder Divided-Chamber Diesel Engine. SAE Technical Paper 831288. doi:10.4271/831288
- [3] Amt für Veröffentlichungen (2009) Verordnung (EG) Nr. 443/2009 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 23. April 2009 zur Festsetzung von Emissionsnormen für neue Personenkraftwagen im Rahmen des Gesamtkonzepts der Gemeinschaft zur Verringerung der CO2-Emissionen von Personenkraftwagen und leichten Nutzfahrzeugen
- [4] Badur J (2016) Ermittlung der Schadstoff- und Klimagasemissionen von Pkw und leichten Nutzfahrzeugen durch WLTP und RDE unter Berücksichtigung zukünftiger Kraftstoffe und Antriebskonzepte. Abschlussbericht, Dessau-Roßlau
- [5] Barths H, Hasse C, Peters N (2000) Computational fluid dynamics modelling of non-premixed combustion in direct injection diesel engines. International Journal of Engine Research 1(3):249–267. doi:10.1243/1468087001545164
- [6] Cuoci A, Frassoldati A, Buzzi Ferraris G, Faravelli T, Ranzi E (2007) The ignition, combustion and flame structure of carbon monoxide/hydrogen mixtures. Note 2: Fluid dynamics and kinetic aspects of syngas combustion. International Journal of Hydrogen Energy 32(15):3486–3500. doi:10.1016/j.ijhydene.2007.02.026
- [7] Eagle WE, Musculus M (2014) Cinema-Stereo Imaging of Fuel Dribble after the End of Injection in an Optical Heavy-Duty Diesel Engine. Thiesel Conference Proceedings

[8]	Eiglmeier C (2001) Phänomenologische Modellbildung des gasseitigen Wandwärmeüberganges in Dieselmotoren, Hannover: Universität
[9]	Europäische Kommission (2020) Gemeinsam für saubere Autos: EU- Kommission in engem Dialog mit Industrie und Politik zu neuer Abgasnorm. https://ec.europa.eu/germany/news/20201120-autos- dialog_de. Zugegriffen: 23. Januar 2021
[10]	Farrell JT, Cernansky NP, Dryer FL, Law CK, Friend DG, Hergart CA, McDavid RM, Patel AK, Mueller CJ, Pitsch H (2007) Development of an Experimental Database and Kinetic Models for Surrogate Diesel Fuels. SAE Technical Paper 2007-01-0201. doi:10.4271/2007-01-0201
[11]	Frassoldati A, Faravelli T, Ranzi E (2006) A wide range modeling study of NOx formation and nitrogen chemistry in hydrogen combustion. International Journal of Hydrogen Energy 31(15):2310– 2328. doi:10.1016/j.ijhydene.2006.02.014
[12]	Frassoldati A, Faravelli T, Ranzi E (2007) The ignition, combustion and flame structure of carbon monoxide/hydrogen mixtures. Note 1: Detailed kinetic modeling of syngas combustion also in presence of nitrogen compounds. International Journal of Hydrogen Energy 32(15):3471–3485. doi:10.1016/j.ijhydene.2007.01.011
[13]	Golloch R (2005) Downsizing bei Verbrennungsmotoren. Ein wirkungsvolles Konzept zur Kraftstoffverbrauchssenkung, 1. Aufl. Downsizing bei Verbrennungsmotoren. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg
[14]	Greeves G, Wang CHT (1978) Origins of Hydrocarbon and Carbon Monoxide Emissions From Diesel Engines. SAE Technical Paper 785061

[15] Greeves G, Khan IM, Wang CHT, Fenne I (1977) Origins of Hydrocarbon Emissions from Diesel Engines. SAE Technical Paper 770259. doi:10.4271/770259

- [16] Grote K-H, Feldhusen J, Dubbel H (2007) Dubbel. Taschenbuch für den Maschinenbau, 22. Aufl. Springer, Berlin, Heidelberg
- [17] Hamann CH, Hoogestraat D, Koch R (2017) Grundlagen der Kinetik. Von Transportprozessen zur Reaktionskinetik. Springer Spektrum, Berlin
- [18] Hames RJ, Merrion DF, Ford HS (1971) Some Effects of Fuel Injection System Parameters on Diesel Exhaust Emissions. SAE Technical Paper 710671. doi:10.4271/710671
- [19] Harris DC (2014) Lehrbuch der quantitativen Analyse, 8. Aufl. Lehrbuch. Springer Spektrum, Berlin, Heidelberg
- [20] Härtl M, Pélerin D, Dworschak P, Maier T, Stadler A, Blochum S, Gaukel K, Jacob E, Wachtmeister G (2018) Potential of the sustainable C1 fuels OME, DMC, and MeFo for particle-free combustion in SI and CI engines. In: Liebl J, Beidl C, Maus W (Hrsg) Internationaler Motorenkongress 2018. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, S 459–478
- [21] Heider G (1996) Rechenmodell zur Vorausrechnung der NO-Emission von Dieselmotoren. Dissertation, Technische Universität München
- [22] Hiroyasu H, Kadota T, Arai M (1983) Development and Use of a Spray Combustion Modeling to Predict Diesel Engine Efficiency and Pollutant Emissions : Part 1 Combustion Modeling. Bulletin of JSME 26(214):569–575. doi:10.1299/jsme1958.26.569
- [23] Hohlbaum B (1992) Beitrag zur rechnerischen Untersuchung der Stickstoffoxid-Bildung schnellaufender Hochleistungsdieselmotoren. Dissertation, Universität Fridericiana zu Karlsruhe
- [24] Joos F (Hrsg) (2006) Technische Verbrennung. Verbrennungstechnik, Verbrennungsmodellierung, Emissionen ; mit 65 Tabellen. Springer, Berlin
- [25] Jung D, Assanis DN (2006) Quasidimensional Modeling of Direct Injection Diesel Engine Nitric Oxide, Soot, and Unburned Hydrocarbon Emissions. Combustion Science and Technology 128(2):388–396. doi:10.1115/1.2056027

[26]	Kaal B (2017) Phänomenologische Modellierung der stationären und transienten Stickoxidemissionen am Dieselmotor. Wissenschaftliche Reihe Fahrzeugtechnik Universität Stuttgart. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden
[27]	Kaal B, Sosio M (2014) Instationäre Modellierung der Partikel- und Stickstoffoxid-Emission am Dieselmotor. Abschlussbericht zum FVV- Vorhaben 1099, Frankfurt am Main
[28]	Kaal B, Grill M, Bargende M (2016) Transient Simulation of Nitrogen Oxide Emissions of CI Engines. SAE Technical Paper 2016-01-1002. doi:10.4271/2016-01-1002
[29]	Karonis D, Lois E, Stournas S, Zannikos F (1998) Correlations of Exhaust Emissions from a Diesel Engine with Diesel Fuel Properties. Energy Fuels 12(2):230–238. doi:10.1021/ef9700588
[30]	Khan IM, Wang CHT, Langridge BE (1972) Effect of Air Swirl on Smoke and Gaseous Emissions from Direct-Injection Diesel Engines. SAE Technical Paper 720102. doi:10.4271/720102
[31]	Koci C, Dempsey A, Nudd J, Knier B (2017) Understanding Hydrocarbon Emissions in Heavy Duty Diesel Engines Combining Experimental and Computational Methods. SAE Int. J. Engines 10(3). doi:10.4271/2017-01-0703
[32]	Koci CP, Fitzgerald RP, Ikonomou V, Sun K (2019) The effects of fuel–air mixing and injector dribble on diesel unburned hydrocarbon emissions. International Journal of Engine Research 20(1):105–127. doi:10.1177/1468087418821827
[33]	Kolaitis DI, Founti MA (2009) On the assumption of using n-heptane as a "surrogate fuel" for the description of the cool flame oxidation of diesel oil. Proceedings of the Combustion Institute 32(2):3197–3205. doi:10.1016/j.proci.2008.06.073
[34]	Kords M (2021) Pkw-Bestand mit Diesel-Motor in Deutschland bis 2021. (in 1.000 Stück). https://de.statista.com/statistik/daten/studie/251779/umfrage/bestand-

von-pkws-mit-diesel-motor-in-deutschland/. Zugegriffen: 06. April 2021

- [35] Kožuch P (2004) Ein phänomenologisches Modell zur kombinierten Stickoxid- und Rußberechnung bei direkteinspritzenden Dieselmotoren. Dissertation, Universität Stuttgart
- [36] Kraftfahrt-Bundesamt (2019) Fahrzeugzulassungen (FZ). Bestand an Kraftfahrzeugen nach Umwelt-Merkmalen. 1. Januar 2019, Flensburg
- [37] Kraftfahrt-Bundesamt (2020) Der Fahrzeugbestand im Überblick am
 1. Januar 2020 gegenüber dem 1. Januar 2019. Zentrales
 Fahrzeugregister (ZFZR), Flensburg
- [38] Lakshminarayanan PA, Nayak N, Dingare SV, Dani AD (2002) Predicting Hydrocarbon Emissions From Direct Injection Diesel Engines. J. Eng. Gas Turbines Power 124(3):708. doi:10.1115/1.1456091
- [39] Lakshminarayanan PA, Aghav YV, Shi Y (2010) Modelling diesel combustion. Mechanical Engineering Series. Springer, Dordrecht
- [40] Mansouri SH, Bakhshan Y (2001) Studies of NOx, CO, soot formation and oxidation from a direct injection stratified-charge engine using the k-ε turbulence model. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering 215(1):95–104. doi:10.1243/0954407011525485
- [41] Marshall WF, Fleming RD (1971) Diesel Emissions as Related to Engine Variables and Fuel Characteristics. SAE Technical Paper 710836. doi:10.4271/710836
- [42] Mehl M, Pitz WJ, Westbrook CK, Curran HJ (2011) Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions. Proceedings of the Combustion Institute 33(1):193–200. doi:10.1016/j.proci.2010.05.027
- [43] Meredith K, Black D (2006) Automated Global Mechanism Generation for Use in CFD Simulations. 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. doi:10.2514/6.2006-1168

[44]	Merker G (2007) Verbrennungsmotoren. Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung. Mit 15 Tabellen, 3. Aufl. Lehrbuch : Maschinenbau. Springer Fachmedien, Wiesbaden
[45]	Merker GP, Teichmann R (2018) Grundlagen Verbrennungsmotoren. Funktionsweise und alternative Antriebssysteme, Verbrennung, Messtechnik und Simulation, 8. Aufl. ATZ/MTZ-Fachbuch. Springer Vieweg, Wiesbaden
[46]	Mork A (2011) Brennverfahren mit Kompressionszündung für alternative Kraftstoffe. Dissertation, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg
[47]	Münz M, Töpfer D, Mokros A, Beidl C (2017) Oxygenate fuel in a Diesel engine – Is a CI engine capable of lambda 1? In: Liebl J, Beidl C (Hrsg) Internationaler Motorenkongress 2017. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, S 457–472
[48]	Münz M, Mokros A, Beidl C (2018) OME in the Diesel engine – a concept for CO2 neutrality and lowest pollutant emissions. In: Liebl J, Beidl C, Maus W (Hrsg) Internationaler Motorenkongress 2018. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, S 445–458
[49]	Nahim HM, Younes R, Nohra C, Ouladsine M (2015) Complete modeling for systems of a marine diesel engine. J. Marine. Sci. Appl. 14(1):93–104. doi:10.1007/s11804-015-1285-y
[50]	Nett O, Yang Q, Pasternak M (2020) Modelling Emissions of Diesel Engine Combustion with Variable Valve Timing. Final report of FVV project no. 1235, Frankfurt am Main
[51]	Northrop WF, Plazas Torres A, Szymkowicz P (2012) Investigation of the Load Limits and Emissions of a Naturally-Aspirated Direct- Injection Diesel Engine. SAE Int. J. Engines 5(2):493–503. doi:10.4271/2012-01-0686
[52]	Olm C, Zsély IG, Varga T, Curran HJ, Turányi T (2015) Comparison of the performance of several recent syngas combustion mechanisms. Combustion and Flame 162(5):1793–1812. doi:10.1016/j.combustflame.2014.12.001

- [53] Pejpichestakul W, Ranzi E, Pelucchi M, Frassoldati A, Cuoci A, Parente A, Faravelli T (2019) Examination of a soot model in premixed laminar flames at fuel-rich conditions. Proceedings of the Combustion Institute 37(1):1013–1021. doi:10.1016/j.proci.2018.06.104
- [54] Perini F, Mattarelli E, Paltrinieri F (2010) Development and Validation of Predictive Emissions Schemes for Quasi-Dimensional Combustion Models. SAE Technical Paper 2010-01-0148. doi:10.4271/2010-01-0148
- [55] Ranzi E, Frassoldati A, Stagni A, Pelucchi M, Cuoci A, Faravelli T (2014) Reduced Kinetic Schemes of Complex Reaction Systems: Fossil and Biomass-Derived Transportation Fuels. Int. J. Chem. Kinet. 46(9):512–542. doi:10.1002/kin.20867
- [56] Ranzi E, Cavallotti C, Cuoci A, Frassoldati A, Pelucchi M, Faravelli T (2015) New reaction classes in the kinetic modeling of low temperature oxidation of n-alkanes. Combustion and Flame 162(5):1679–1691. doi:10.1016/j.combustflame.2014.11.030
- [57] Reif K (2019) Dieselmotor-Management. Systeme, Komponenten, Steuerung und Regelung, 6. Aufl. Bosch Fachinformation Automobil. Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH, Wiesbaden
- [58] Rether D, Grill M, Schmid A, Bargende M (2010) Quasi-Dimensional Modeling of CI-Combustion with Multiple Pilot- and Post Injections. SAE Int. J. Engines 3(1):12–27. doi:10.4271/2010-01-0150
- [59] Richter G, Zellbeck H (2017) OME als Kraftstoffersatz im Pkw-Dieselmotor. MTZ Motortech Z 78(12):66–73. doi:10.1007/s35146-017-0131-y
- [60] Rohs H, Becker M, Greis A, Wieske P (2004) Reduktionspotential für Ruß und Kohlenmonoxid zur Vermeidung des CO-Emissionsanstiegs bei modernen PKW-DI-Dieselmotoren mit flexibler Hochdruckeinspritzung. Abschlussbericht des FVV Vorhaben Nr. 791

[61]	Schintzel K (2005) Kohlenwasserstoff-Emissionen eines Motors mit Benzin-Direkteinspritzung und wandgeführtem Brennverfahren. Dissertation, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg
[62]	Swantek A, Duke D, Tilocco F, Sovis N, Powell C (2014) End of Injection, Mass Expulsion Behaviors in Single Hole Diesel Fuel Injectors. Proceedings of ILASS Americas
[63]	Tschöke H, Mollenhauer K, Maier R (2018) Handbuch Dieselmotoren, 4. Aufl. Springer Reference Technik. Springer Vieweg, Wiesbaden
[64]	Tsurushima T (2009) A new skeletal PRF kinetic model for HCCI combustion. Proceedings of the Combustion Institute 32(2):2835–2841. doi:10.1016/j.proci.2008.06.018
[65]	Ünal Ö (2020) Phänomenologische Modellierung der Dieselverbrennung auf homogenem Grundgemisch, 1. Aufl. Wissenschaftliche Reihe Fahrzeugtechnik Universität Stuttgart. Springer Fachmedien Wiesbaden; Imprint: Springer Vieweg, Wiesbaden
[66]	Werner P, Schommers J, Breitbach H, Spengel C (2011) Der neue V6- Dieselmotor von Mercedes-Benz. MTZ Motortech Z 72(5):366–373. doi:10.1365/s35146-011-0088-1
[67]	Westbrook CK, Dryer FL (1981) Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames. Combustion Science and Technology 27(1-2):31–43. doi:10.1080/00102208108946970
[68]	Yang Q (2020) A quasi-dimensional Charge Motion and Turbulence Model for Combustion and Emissions Prediction in Diesel Engines with a fully Variable Valve Train. Dissertation, Universität Stuttgart
[69]	Yang Q, Bargende M, Grill M (2019) Integrated flow model with combustion and emission model for VVT Diesel engine. In: Bargende M, Reuss H-C, Wagner A, Wiedemann J (Hrsg) 19. Internationales Stuttgarter Symposium, Bd 70. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, S 699–718

- [70] Yu RC, Wong VW, Shahed SM (1980) Sources of Hydrocarbon Emissions from Direct Injection Diesel Engines. SAE Technical Paper 800048. doi:10.4271/800048
- [71] Yu RC, Kuo T-W, Shahed SM, Chang TW (1983) The Effect of Mixing Rate, End of Injection, and Sac Volume on Hydrocarbon Emissions from a D.I. Diesel Engine. SAE Technical Paper 831294. doi:10.4271/831294
- [72] Zhang K, Liang Z, Wang J, Wang Z (2013) Diesel diffusion flame simulation using reduced n-heptane oxidation mechanism. Applied Energy 105:223–228. doi:10.1016/j.apenergy.2013.01.006
- [73] Zheng J, Miller DL, Cernansky NP (2004) A Global Reaction Model for the HCCI Combustion Process. SAE Technical Paper 2004-01-2950. doi:10.4271/2004-01-2950