

Dissertation

POTENTIAL DER SIMULATION ZUR OPTIMIERUNG VON  
VERBRENNUNG UND SCHADSTOFFBILDUNG BEI  
MITTELSCHNELLAUFENDEN GROBDIESELMOTOREN

EINE BEWERTUNG VON NULL- UND DREIDIMENSIONALEN  
MODELLANSÄTZEN

Verfasser:

Dipl.-Ing. Gernot Hirschl

Eingereicht am Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik der  
Technischen Universität Graz

Betreuer:

Ao. Univ.-Prof. DI Dr. Andreas Wimmer

Ausgeführt zum Zweck der Erlangung des akademischen Grades  
des Doktors der technischen Wissenschaften  
an der Technischen Universität Graz

Juli 2013



## Vorwort

Die Grundlage für die Verfassung dieser Dissertation stellte meine langjährige Tätigkeit als Berechnungsingenieur am Großmotorenkompetenzzentrum (LEC) der Technischen Universität Graz dar. Die tägliche Arbeit war nicht zuletzt durch die enge Kooperation mit der Industrie sehr herausfordernd und von vielen Interessen geprägt, die es zufriedenzustellen galt.

Daher möchte ich mich zuerst bei Herrn Ao. Univ.-Prof. Dr. Andreas Wimmer für die Betreuung der Arbeit und für sein Engagement zur häufigen wissenschaftlichen Publizierung auf internationalen Fachkonferenzen bedanken. Ohne die zahlreiche Publikationstätigkeit wäre die Abfassung dieser Dissertation nicht möglich gewesen.

Dem FM250 Forschungsteam danke ich für das ausgezeichnete Arbeitsklima und Dr. Michael Engelmayer für die eingebrachten Anregungen und fachlichen Diskussionen zum Gelingen dieser Arbeit.

Für die Finanzierung meiner Arbeit möchte ich mich beim *Kompetenzzentrum Das virtuelle Fahrzeug*, speziell bei Dr. Michael Nöst für die Projektleitung und die freundschaftliche Zusammenarbeit recht herzlich bedanken.

Weiters möchte ich Herrn Univ.-Prof. Dr. Günter Merker für die Zweitbegutachtung danken. Herrn Dr. Franz Chmela danke ich für sein reges Interesse und dem Korrekturlesen der Arbeit.

Mein größter Dank gebührt allerdings meinen Eltern und meiner Frau für die jahrelange Unterstützung.

*Gernot Hirschl*

*Graz, im Juli 2013*

# Inhaltsverzeichnis

VORWORT.....	I
INHALTSVERZEICHNIS.....	II
FORMELZEICHEN, INDIZES UND ABKÜRZUNGEN.....	IV
KURZFASSUNG.....	VII
ABSTRACT.....	VIII
1 EINLEITUNG.....	- 1 -
1.1 MOTIVATION.....	- 1 -
1.2 ZUKÜNFTIGE GESETZGEBUNG.....	- 2 -
1.3 EINSATZSPEKTREN UND GLIEDERUNG VON GROBDIESELMOTOREN.....	- 4 -
1.4 EINGESETZTER VERSUCHSTRÄGER.....	- 6 -
1.5 ZIELSETZUNG.....	- 8 -
2 STAND DER TECHNIK.....	- 9 -
2.1 BRENNVERFAHREN FÜR GROBDIESELMOTOREN.....	- 9 -
2.1.1 Aktuelle Entwicklungen und Technologien.....	- 9 -
2.1.2 Emissionserfüllungsstrategien.....	- 13 -
2.1.3 Abgasrückführungskonzepte für Großmotoren.....	- 15 -
2.2 SIMULATIONSMODELLE ZUR BRENNVERFAHRENOPTIMIERUNG.....	- 20 -
2.2.1 Einteilung.....	- 20 -
2.2.2 Brennratenmodelle.....	- 22 -
2.2.3 Stickoxidmodelle.....	- 25 -
3 EINGESETZTE SIMULATIONSMODELLE.....	- 27 -
3.1 BRENNRATENMODELLE.....	- 27 -
3.1.1 Zweizonen-Rechenmodell LEC-DCM (Diesel Combustion Model).....	- 27 -
3.1.2 Mehrzonen-Paketmodell MZCM (Multi Zone Combustion Model).....	- 29 -
3.1.3 ECFM-3Z Modell (3-Zones Extended Coherent Flame Model).....	- 31 -
3.2 SCHADSTOFFBILDUNGSMODELLE.....	- 33 -
3.2.1 Stickoxidbildungsmechanismen.....	- 33 -
3.2.2 Reaktionskinetisches NO-Modell nach Pattas und Häfner.....	- 35 -
3.2.3 Lund Flamelet Russmodell.....	- 37 -
4 VERBESSERTES SIMULATIONMODELL FÜR STICKOXID.....	- 38 -
4.1 EINFLUSSGRÖßEN UND MODELLVERBESSERUNGEN.....	- 38 -
4.1.1 Theorie der turbulenten kinetischen Energiedichte.....	- 38 -
4.1.2 Einfluss der Stoßfrequenz auf die Berechnung von Stickoxid.....	- 39 -
4.1.3 Wirkung des Mindestluftbedarfs und Einfluss auf die Stoßfrequenz.....	- 42 -
4.1.4 Einfluss der Geschwindigkeitskonstanten.....	- 43 -
4.1.5 Örtliches Luftverhältnis.....	- 45 -
4.2 VERIFIKATION.....	- 47 -
5 DIE EINSPRITZRATE ALS GRUNDLAGE FÜR DIE SIMULATION DER DIESELMOTORISCHEN VERBRENNUNG.....	- 51 -
5.1 BEDEUTUNG DER EINSPRITZRATE.....	- 51 -
5.2 METHODEN ZUR BESTIMMUNG DER EINSPRITZRATE.....	- 53 -
5.2.1 Indirekte Methoden zur Bestimmung der Einspritzrate.....	- 53 -
5.2.2 Direkte Methode zur Bestimmung der Einspritzrate.....	- 55 -
5.3 BRENNRATENSIMULATION MIT GEMESSENER UND GERECHNETER EINSPRITZRATE.....	- 58 -
5.4 SENSITIVITÄTSANALYSE.....	- 65 -
5.5 SCHLUSSFOLGERUNGEN ZUR EINSPRITZRATE.....	- 71 -

6	BEWERTUNG DER PROGNOSEFÄHIGKEIT .....	- 72 -
6.1	MODELLABSTIMMUNG .....	- 72 -
6.2	EINFLUSS WESENTLICHER ENTWICKLUNGSPARAMETER .....	- 75 -
6.2.1	Variation der Last und Drehzahl .....	- 75 -
6.2.2	Variation der AGR-Rate .....	- 77 -
6.2.3	Variation Einspritzdruck .....	- 81 -
6.2.4	Variation Ladedruck .....	- 85 -
6.2.5	Variation Brennbeginn .....	- 89 -
6.2.6	Variation Einspritzdruck mit konstanter AGR-Rate .....	- 93 -
6.2.7	Variation Hubvolumen .....	- 97 -
6.3	ABSCHLIEßENDE MODELLBEWERTUNG .....	- 99 -
7	ZUSAMMENFASSUNG .....	- 103 -
	LITERATURVERZEICHNIS .....	- 104 -
	ABBILDUNGSVERZEICHNIS .....	- 110 -
	TABELLENVERZEICHNIS .....	- 113 -

# Formelzeichen, Indizes und Abkürzungen

## Lateinische Formelzeichen

$A_0$	$m^2$	Düsenquerschnittsfläche
$\mu A$	$m^2$	effektive Düsenquerschnittsfläche
$A$	-	präexponentieller Faktor
$B$	-	präexponentieller Faktor
$C_{Turb}$	-	Konstante zur Umwandlung der kinetischen Energie
$C_{Mod}$	-	Modellkonstante
$C_{NO,kin}$	-	Innere NO-Konstante
$C_{NO,out}$	-	Äußere NO-Konstante
$C_{Spray}$	-	Einspritzstrahlkonstante
$C_{out}$	-	Konstante der Ausbrennphase
$E_a$	J/mol	Aktivierungsenergie
$E_{kin}$	m/s	kinetische Energie
$f$	1/s	Stoßfrequenz der Moleküle
$f$	-	Relaxationsfunktion
$f_{Jet}$	-	Mischungsbruch der Kraftstoffmasse
$H_u$	kJ/kg	spezifischer Heizwert (früher: unterer Heizwert)
$\dot{I}$	kg m/s <sup>2</sup>	Impulsfluss
$k$	m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>	turbulente kinetische Energiedichte
$\sqrt{k}$	m/s	Transportgeschwindigkeit
$K_b$	-	Reaktionskinetikparameter
$k_i$	cm <sup>3</sup> /mol s	Geschwindigkeitskonstante der Reaktion i
$l$	m	charakteristische Größe bzw. Längenmaßstab
$L_{stöch}$	kg L/kg B	Mindestluftbedarf
$L_{stöch, AGR}$	kg L/kg B	Korrigierter Mindestluftbedarf für AGR
$m_{diff,verf}$	kg	Verf. Kraftstoffmasse der Diffusionsverbrennung
$m_{fr}, m_{fuel}$	kg	eingespritzte Kraftstoffmasse
$m_{spray}$	kg	Masse des Spraykegels
$m_{out,avail}$	kg	Verfügbare Kraftstoffmasse der Ausbrennphase
$\dot{m}_K$	kg/s	Kraftstoffmassenstrom
$p_{LE}$	bar	Leitungsdruck
$p_0$	bar	Gegendruck im Brennraum
$Q_B$	J	Energieumsatzrate
$r_{Mag}$	kg/s	Reaktionsrate nach Magnussen
$R_i$	mol/cm <sup>3</sup> s	Reaktionsrate der Reaktion i
$R_m$	J/mol K	molare Gaskonstante
$s$	m	Strahlpenetrationslänge
$S_{C_r}$	-	turbulente Schmidt-Zahl
$T$	K	Temperatur
$u_{eff}$	m/s	Düsenaustrittsgeschwindigkeit
$\tilde{u}_i$	m/s	mittlere Strömungsgeschwindigkeit
$V, V_{cyl}$	m <sup>3</sup>	Hubvolumen
$\dot{V}_k$	m <sup>3</sup> /s	Kraftstoff-Volumenstrom
$x_i$	m	Kartesische Koordinate
$x_{fuel}$	-	Massenanteil Kraftstoff
$x_{O_2}$	-	Massenanteil Sauerstoff
$\tilde{y}_x$	-	Mittlerer Massenbruch der Spezieskonzentration
$y^+$	-	dimensionslose Wandabstand
$Y_{Mix}$	-	Kraftstoffmassenbruch im Einspritzstrahl
$\tilde{Z}$	-	Mittelwert des Mischungsbruchs

## Griechische Formelzeichen

$\alpha$	-	NO-Konzentrationskonstante
$\beta_m$	m	Konstante
$\varepsilon$	$m^2/s^3$	Dissipation
$\varepsilon$	-	Verdichtungsverhältnis
$\zeta$	-	Geschwindigkeitsmaßstab
$\eta$	-	Wirkungsgrad
$\eta_{th}$	-	thermodynamischer Wirkungsgrad
$\eta_e, \eta_i$	-	effektiver; innerer Wirkungsgrad
$\eta_m$	-	mechanischer Wirkungsgrad
$\eta_{i-HP}$	-	innerer Wirkungsgrad des Hochdruckprozesses
$\Theta$	°	Strahlkegelwinkel
$\kappa$	-	Isentropenexponent
$\lambda, \lambda_v$	-	Luftverhältnis, Luftzahl
$\mu$	-	Durchflusszahl; Überströmkoefizient
$\mu_t$	-	turbulente Wirbelviskosität
$\rho_k$	$kg/m^3$	Dichte des Kraftstoffs
$\tau_1$	s	Zeitskala der turbulenten Strömung
$\tau_{ch}$	s	Zeitskala der chemischen Reaktionen
$\tau_m$	s	Mischungszeitmaßstab
$\varpi_i$	$J/m^3s$	Quellterm

## Chemische Formelzeichen

CO	Kohlenmonoxid
CO <sub>2</sub>	Kohlendioxid
CN	Cyanid-Radikal
H	atomarer Wasserstoff
H <sub>2</sub>	Wasserstoff
HC	Kohlenwasserstoffe
HCN	Blausäure oder Cyanidwasserstoff
N	atomarer Stickstoff
N <sub>2</sub>	Stickstoff
NH <sub>3</sub>	Ammoniak
N <sub>2</sub> O	Distickstoffoxid
NO	Stickstoffmonoxid
NO <sub>2</sub>	Stickstoffdioxid
OH	Hydroxyl-Radikal
PAH	Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe

## Weitere Indices und Abkürzungen

G	Gleichgewichtszustand
v	Vorreaktion
r	Rückreaktion
tot	total
pre	vorgemischte Verbrennung
diff	Diffusionsverbrennung
out	Ausbrennphase
Rek	Rekuperation
LW	Ladungswechsel
OD	nulldimensional

1D	eindimensional
3D	dreidimensional
AGR	Abgasrückführung
ATL	Abgasturboaufladung
BB	Brennbeginn
BMEP	Break Mean Effective Pressure (eff. Mitteldruck), bar
CATO	Combustion Analysis Tool
CFD	Computational Fluid Dynamics
$Da = \tau_l / \tau_{ch}$	Damköhler-Zahl
DCM	Diesel Combustion Model
DOC	Diesel Oxidations Katalysator
DoE	Design of Experiments
DPF	Diesel Partikel Filter
ECFM-3Z	3-Zones Extended Coherent Flame Model
EGR	Exhaust Gas Recirculation
EOC	End of Combustion
EPA	Environmental Protection Agency
EPG	Electrical Power Generation
FIRE®	Flows in Reciprocating Engines, CFD-Software der Fa. AVL
KV	Einspritzkegelvolumen
KW	Kurbelwinkel
IMEP	Indicated Mean Effective Pressure (indizierter Mitteldruck), bar
IMO	International Maritime Organisation
ISFC	Indicated Specific Fuel Consumption (indizierter Verbrauch), g/kWh
LEC	Large Engines Competence Center
LKW	Lastkraftwagen
MCC	Mixing Controlled Combustion
MCE	Multi Cylinder Engine
MZCM	Multi Zone Combustion Model
NFZ	Nutzfahrzeug
OT	Oberer Totpunkt
PM	Particulate Matter
PLD	Pumpe Leitung Düse
ppm	Parts per Million
SCA	Spray Cone Angle (Spraykegelwinkel)
SCE	Single Cylinder Engine
SCR	Selective Catalytic Reduction
SOC	Start of Combustion
stöch	Stöchiometrisch

### Operatoren und Bezeichnungen

[P]	Konzentration der Spezies P in mol/cm <sup>3</sup>
d	vollständiges Differential
$\partial$	partiell Differential
$\Sigma$	Summe
$\Delta$	Differenz zweier Größen
.	zeitliche Ableitung

## Kurzfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden unterschiedliche null- und dreidimensionale Simulationsmodelle zur Vorausberechnung von Verbrennung und Schadstoffbildung eingesetzt. Die Bewertung der Modelle erfolgte anhand von umfangreichen Parameterstudien an einem mittelschnelllaufenden Großdieselmotor. Die Bandbreite der eingesetzten Modelle spiegelt dabei null-, quasi- als auch mehrdimensionale Modellvorstellungen wider.

Auch zukünftige Emissionserfüllungskonzepte wurden hinsichtlich der Möglichkeiten des AGR-Transports mit der thermodynamischen Ladungswechselrechnung untersucht. Für die festgelegten Randbedingungen konnte für eine diskontinuierliche Aufteilung des Abgasmassenstroms Vorteile gegenüber konventionellen System wie Spenderzylinder oder AGR-Lader gefunden werden.

Hinsichtlich der Validierung der null- und dreidimensionalen Modellkette ist festzustellen, dass natürlich die Eingabeparameter, vor allem aber die Einspritzrate die Simulation entscheidend beeinflusst. Umfassende Vergleiche und Sensitivitätsanalysen belegten die Notwendigkeit einer exakten Einspritzrate zur Voroptimierung von Verbrennung, Stickoxid und Russ.

Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeit stellte die Verbesserung eines auf Basis des erweiterten Zeldovich-Mechanismus basierenden Stickoxidmodells für eine nulldimensionale Entwicklungsumgebung dar. Es gelang, die bisher unzulängliche Genauigkeit in der Prognose von Stickoxid für eine Vielzahl von Variationen über der Motorlast durch die Berücksichtigung von zusätzlichen Einflussgrößen wesentlich zu verbessern.

## Abstract

The scope of this work was to investigate several 0D and 3D simulation models based on extensive parameter studies in order to predict combustion and pollutant formation in large diesel engines. The range of the models includes zero, quasi-dimensional as well as multidimensional concepts.

In addition, concepts fulfilling future emission standards for large diesel engines were investigated for how EGR is implemented using 1D cycle analysis. Advantages were found for a discontinuous system with fixed boundary conditions as compared to a broad variety of concepts such as those with a donor cylinder or EGR turbocharger.

Not only the input parameters but also more importantly the injection rate history have a great impact on the calibration process for 0D and 3D simulation. Comprehensive studies and sensitivity analysis have verified the necessity of the rate of injection history for pre-optimization of combustion and pollutant formation.

Another main focus of the work was to improve a nitrogen oxide model for a zero-dimensional development environment using the extended Zeldovich mechanism. By considering additional influencing variables, the insufficient accuracy in predicting nitrogen oxide was able to be substantially improved in the case of a large number of variations examined at several different engine loads.

# 1 Einleitung

## 1.1 Motivation

Die immer strengeren Emissionsgesetzgebungen, vor allem aber das Inkrafttreten von US EPA TIER4 im Jahr 2015 stellt für den Großmotorenbereich eine enorme Herausforderung dar. Um grundlegende Entwicklungen und Optimierungen rasch und kosteneffizient realisieren zu können, ist der Einsatz von zuverlässigen Simulationswerkzeugen zur Voroptimierung von Verbrennungskonzepten erforderlich. Insbesondere in der frühen Phase der Motorenentwicklung ist ein hoher Entwicklungsaufwand notwendig, um simulationsbasiert einen virtuellen Prototyp zu entwickeln. Aufbauend auf dieser ersten virtuellen Auslegungsstufe des Motors werden in der Simulation Parameterstudien durchgeführt, deren Umfang weit größer ist als es am Prüfstand machbar bzw. vertretbar wäre. Natürlich kann nicht auf Tests und Prüfstandsuntersuchungen verzichtet werden - die Qualität der untersuchten Komponenten nimmt aber zu und die Vorgehensweise bei der Optimierung am Prüfstand wird durch die bereits durchgeführten Simulationen schon in eine vielversprechende Richtung geführt. Im Verlauf der Motorenentwicklung wird die Optimierung des gewählten Konzepts durch begleitende Simulationen unterstützt. Dadurch gelingt es, den Gütegrad der Modelle weiter zu verbessern.

Die Bandbreite der eingesetzten Werkzeuge reicht von der 0D- und 1D-Simulation bis hin zur 3D-CFD Simulation zur Optimierung von Gemischbildung und Verbrennung. Diese simulationsunterstützte Vorgehensweise ermöglicht wichtige Konzeptentscheidungen schon sehr früh im Entwicklungsprozess zu treffen. Dadurch sinken die Entwicklungszeiten und -kosten. Potentielle Simulationsmodelle müssen für einen begleitenden Einsatz zum Versuch rasch und einfach kalibrierbar sein, kurze Rechenzeiten und eine hohe Prognosefähigkeit aufweisen. In dieser Arbeit wird darauf eingegangen, inwieweit null- und dreidimensionale Simulationsmethoden für die Voroptimierung von Verbrennungskonzepten für Großdieselmotoren einsetzbar sind.

Die Genauigkeit der Simulation hängt dabei einerseits von der Qualität der Simulationsmodelle, andererseits vom nicht unwesentlichen "Know How" des Entwicklungsingenieurs ab. Insbesondere die Modellierung der komplexen Vorgänge der dieselmotorischen Verbrennung und Schadstoffbildung stellt nach wie vor eine Herausforderung dar.

Die Motivation, Verbrennung und Schadstoffbildung noch präziser darzustellen, bildet den Schwerpunkt dieser Dissertation.

## 1.2 Zukünftige Gesetzgebung

Der Großdieselmotorensektor ist zukünftig mit einer drastischen Reduktion des gesetzlich erlaubten Ausstoßes von umweltschädlichen Abgasen konfrontiert. Bereits im Jahr 1996 wurde von der Environmental Protection Agency (EPA), dem California Air Resources Board (ARB) und den Motorenherstellern ein Grundsatzpapier verabschiedet, mit dem die Vorgangsweise zur Einführung von neuen Abgasgesetzgebungen festgelegt wurde. Die IMO (International Maritime Organization) schreibt die generellen Rahmenbedingung für die internationale Schifffahrt vor - relevante Festsetzungen sind durch zusätzliche Protokolle geregelt [1]. Für die unterschiedlichen Anwendungen von Großmotoren sind die Emissionsgrenzen bis zum Jahr 2020 festgelegt. Aktuell gültig ist für Lokomotiven die Emissionsstufe TIER 2 in Nord-Amerika - in Europa die Stufe IIIB. Bei Schiffen gilt derzeit der IMO TIER II Standard.

Die Abgasnorm nach US EPA unterteilt sich in 4 Emissionsstufen (Englisch: TIER) und legt die Limitierung von umweltschädlichen Schadstoffen wie Stickoxide ( $\text{NO}_x$ ), unverbrannte Kohlenwasserstoffe (HC), Kohlenmonoxid (CO) und Partikel (PM) fest. War es bisher für die Stufen TIER 1 bis TIER 3 noch möglich, die Abgasgesetzgebung mit innermotorischen Maßnahmen zu erfüllen wie etwa durch Optimierung von Einspritzzeitpunkt, Einspritzdruck und Millersteuerzeit, so erfordert TIER 4 eine wesentliche Verbesserung bisheriger Verbrennungskonzepte.

Das Inkrafttreten von TIER 4 verlangt von mittelschnelllaufenden Lokomotivmotoren eine Reduktion von Stickoxid und Partikeln um mehr als 80%. Der  $\text{NO}_x$ -Grenzwert muss von derzeit 7.4 g/kWh auf 1.74 g/kWh gesenkt werden [7]. Ähnlich verhält es sich bei anderen Applikationen wie beispielsweise Generator- oder Marineanwendungen. Für Marineanwendung ist durch den IMO TIER III Standard ab 1. 1. 2016 eine Reduzierung der  $\text{NO}_x$ -Emissionen innerhalb der ECAs (Emission Control Areas) auf etwa 2 g/kWh gefordert, durch die EPA TIER 4 Emissionsstufe auf 1.8 g/kWh [7]. Betroffen sind Schiffsdieselmotoren mit einer Leistung von über 130 kW in Abhängigkeit des Datums der Kiellegung [2]. Als zukünftige Stickoxid-Überwachungsgebiete mit gleichzeitig neuen Anforderungen an die Kraftstoffqualität wurden US-Küstenlinien festgelegt [3].

Am stärksten reglementiert US EPA TIER 4 allerdings den Schadstoffausstoß bei Großmotoren zur elektrischen Energieerzeugung. Hier verlangt TIER 4 eine Reduktion von Stickoxid um weitere 50% im Vergleich zu Lokomotive oder Schiff. Der gesetzliche Grenzwert für Nord-Amerika liegt mit 0.67 g/kWh für  $\text{NO}_x$  und 0.03 g/kWh für Partikel auf dem Niveau der Euro 6 Gesetzgebung für LKW [7]. In Abbildung 1-1 sind aktuelle und zukünftige Stickoxidgrenzwerte nach US EPA und EU-Gesetzgebung für unterschiedliche Applikationen von Großdieselmotoren dargestellt.

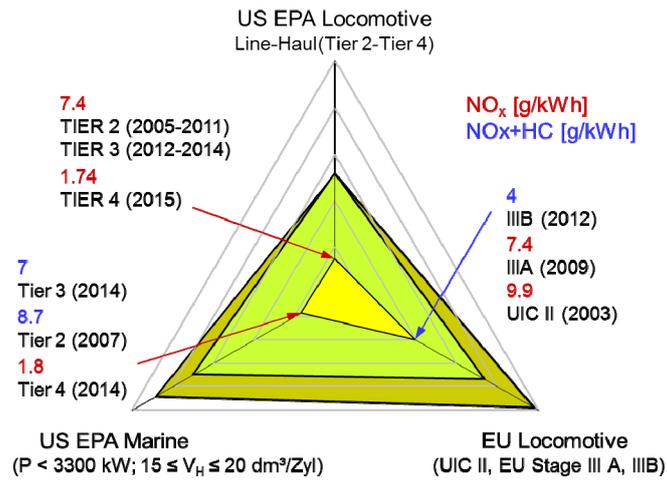


Abbildung 1-1: Aktuelle und zukünftige Stickoxid-Emissionsstandards

Für Lokomotiven trat die europäische Stufe IIIB bereits 2012 in Kraft und begrenzt NO<sub>x</sub> und HC in Summe auf 4 g/kWh pro Zyklus. Bei Partikeln verlangt die europäische Stufe IIIB bereits eine drastische Reduktion von 0.2 auf 0.025 g/kWh. Im Gegensatz dazu schreibt US EPA TIER 3 noch 0.13 g/kWh vor. Die amerikanische EPA TIER 4 Stufe fordert 0.04 g/kWh. Derzeitige und zukünftige Emissionszenarien für Partikel nach US EPA und EU zeigt Abbildung 1-2 für Lokomotive- und Marineanwendungen.

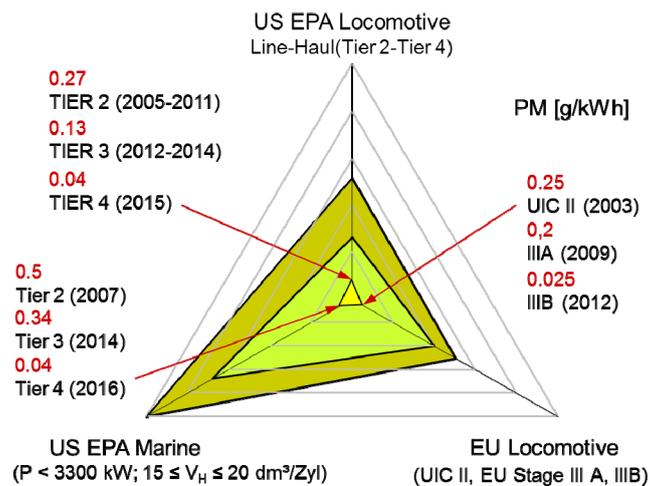


Abbildung 1-2: Aktuelle und zukünftige Russ-Emissionsstandards

Zur Erfüllung der gesetzlichen Grenzwerte wird die Summe aller gewichteten Betriebspunkte für eine Zyklusbildung herangezogen. Zukünftig erschwerend kommt hinzu, dass mit TIER 4 einzelne Betriebspunkte auch getrennt gewichtet werden. Für Lokomotiven reglementiert der Notchstandard [7] die Abweichung des lastpunktabhängigen Emissionsniveaus. Marineanwendungen werden durch Not-to-exceed Limits reglementiert, die nur eine 1.5 fache Überschreitung des NO<sub>x</sub>-und PM-Grenzwertes in definierten Lastpunkten erlauben [7].

### 1.3 Einsatzspektren und Gliederung von Großdieselmotoren

Die in der Regel stationäre Betriebsweise von Großmotoren ermöglicht höchste thermische Wirkungsgrade, geringe spezifische Kraftstoffverbräuche und eine Anwendung sowohl nach dem Vier- als auch Zweitaktprinzip. Das Einsatzgebiet von Großmotoren liegt traditionell im Güter- und Personentransport mit Lokomotiven oder Schiffen, der elektrischen Stromerzeugung in der Öl- bzw. Gasindustrie und im Militärbereich. Als Kraftstoffe kommen sowohl konventioneller Dieselkraftstoff, Schweröle, Methan- und Sondergase aber auch Tierfette zum Einsatz. Das Leistungsspektrum von Großdieselmotoren liegt zwischen 0.5 bis 88 MW, wobei der marktdominierende Anteil von schnell- und mittelschnelllaufenden Motoren repräsentiert wird [7]. Langsamlaufende Anwendungen sind in der Regel nach dem Zweitaktverfahren ausgeführt und finden in großen Frachtschiffen Verwendung.

Der große Leistungsbereich von Großmotoren wird über unterschiedlichste Motorengrößen abgedeckt. Eine Unterteilung von Großmotoren erfolgt daher typischerweise nach der Drehzahl und ist in Tabelle 1-1 dargestellt.

Typ	Drehzahl [1/min]	Mittlere Kolbengeschw. [m/s]
Schnellläufer	1000 - 2000	7 - 13
Mittelschnellläufer	330 - 1200	6 - 12
Langsamläufer	20 - 170	5 - 9

Tabelle 1-1: Gliederung von Großmotoren nach [6]

Ein typischer mittelschnelllaufender Großmotor ist durch Bohrungsdurchmesser in der Größenordnung von 250 mm charakterisiert, ein Schnellläufer weist Bohrungen zwischen 170 bis 190 mm auf. Der Leistungsbereich von Mittelschnellläufern liegt in etwa bei 2 MW bis 8 MW und spielt eine tragende Rolle als Antriebsaggregat für viele Bereiche der Technik. Der Wirkungsgrad stationär betriebener mittelschnelllaufender Großdieselmotoren liegt im Bestpunkt bei ca. 43%, jener von Gasmotoren aufgrund der wesentlich geringeren Verbrennungs- und Ladungswechselverluste bei beachtlichen 44-48% [5]. Eine Übersicht der erreichbaren Wirkungsgrade des Dieselmotors in Abhängigkeit von der Motorgröße im Vergleich zu seiner Konkurrenz zeigt Abbildung 1-3.

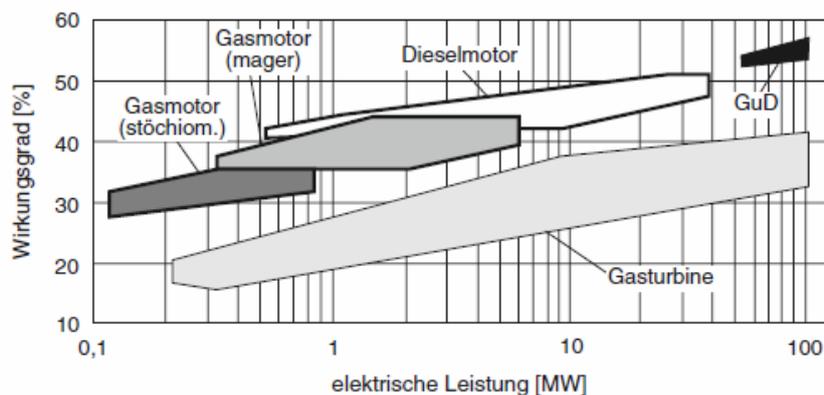


Abbildung 1-3: Wirkungsgrad- und Leistungsspektrum von Kraftmaschinen [17]

Die Marktanteile für schnelllaufende Großmotoren sind aufgrund des breiteren Einsatzspektrums gegenüber Mittelschnellläufern deutlich höher. Jedoch musste auch der Großmotorensektor in den letzten Jahren aufgrund der Wirtschaftskrise rückläufige Verkaufszahlen verzeichnen. So sank die verkaufte Stückzahl bei Mittelschnellläufern um mehr als 50% im Jahr 2010 gegenüber dem Jahr 2008, bei Schnellläufern brach der Markt ebenfalls um mehr als 30% ein, siehe Abbildung 1-4. Die derzeitigen Marktanteile von Lokomotiven sowohl für Mittelschnell- als auch Schnellläufer liegen im Bereich von 2-5%, wobei die Hauptabsatzmärkte für mittelschnelllaufende Lokomotivmotoren die USA, Russland und China sind. Der Markt für Marinemotoren ist sehr breit gefächert. Er unterteilt sich in Branchen für den Freizeit- bzw. gewerblichen Bereich, in den Personen- und Gütertransport.

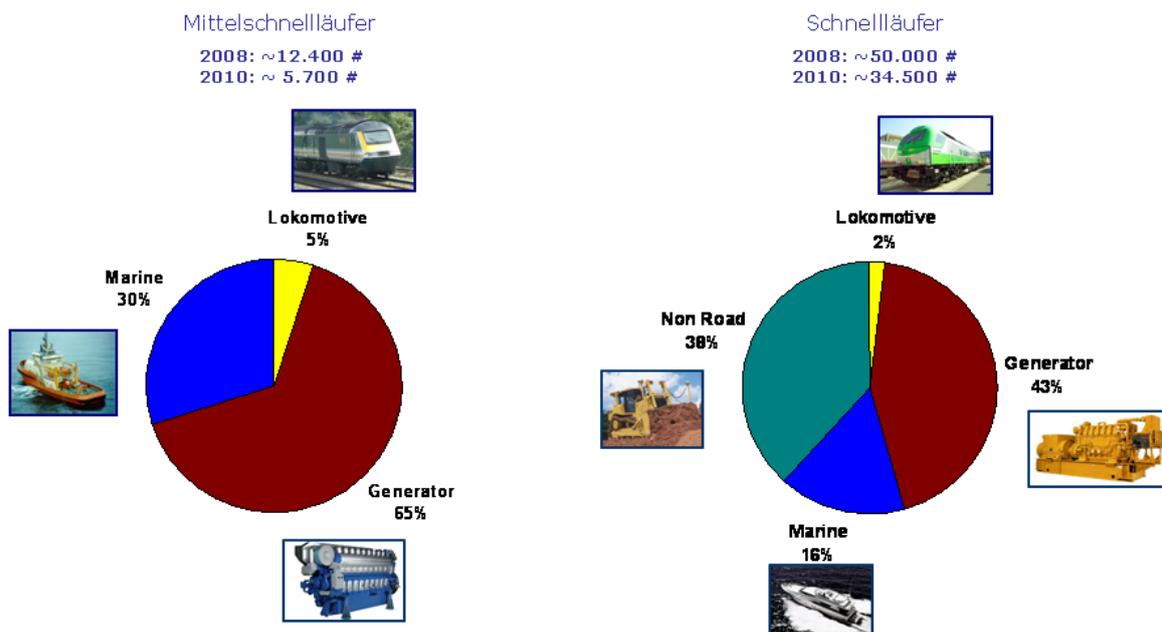


Abbildung 1-4: Marktanteile von Großdieselmotoren [8]

Das größte Einsatzgebiet für mittelschnell- und schnelllaufende Großdieselmotoren stellt die Erzeugung von elektrischem Strom dar. Die Motoren werden in der Regel zur Abdeckung von Spitzenlasten in Kraftwerken oder als Notstromaggregate herangezogen. Auch bei Generatoranwendungen ist in den letzten Jahren ein Sinken der Verkaufszahlen zu beobachten, da der Markt sehr stark vom Bevölkerungs- und Wirtschaftswachstum abhängt. Der vermehrte Gebrauch von Kraftwärmekopplungen und der Ausbau der Energieversorgung stellen auch für die Zukunft weitere Wachstumspotentiale dar.

Zu Großmotoren für den mobilen Non-Road Bereich zählen in erster Linie Schnellläuferanwendungen wie Baumaschinen, Muldenkipper sowie Aggregate für Öl- und Gasfelder. Dieses Marktsegment ist ebenfalls von der konjunkturellen Nachfrage der Bauindustrie und bedingt durch notwendige Änderungen am Gesamtmotorsystem stark von der Gesetzgebung abhängig.

Zu den weltweit führenden Herstellern von Großmotoren zählen GE, MAN, MTU, Caterpillar, Komatsu und Cummins.

## 1.4 Eingesetzter Versuchsträger

Der einmalige Abgleich der Simulation und der notwendige Modellkalibrierungsprozess verlangt Messergebnisse vom Motorenprüfstand. Da der Aufbau eines kompletten Vollmotors<sup>1</sup> (MCE) zu kostenintensiv und eine aufwändige Infrastruktur verlangt, wird die notwendige Entwicklungsarbeit am Prüfstand an Einzylinder-Forschungsmotoren (SCE) durchgeführt. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Untersuchungen für eine Lokomotiv-Applikation eines mittelschnelllaufenden Großdieselmotors durchgeführt.

Der Versuchsträger verfügt über eine Bohrung von 250 mm und einem Hub von 320 mm, wobei durch das flexibel gehaltene Prüfstandskonzept Bohrungsdurchmesser von 170 mm bis 300 mm realisiert werden können. Für den Motorbetrieb werden sowohl konventioneller Dieselkraftstoff als auch alternative flüssige und gasförmige Kraftstoffe eingesetzt. Als Einspritzsystem wird ein von der Firma Bosch zur Verfügung gestelltes Common Rail System verwendet.

Weiters verfügt der Forschungsmotor über ein experimentelles AGR-System zur Realisierung externer gekühlter Abgasrückführraten, einen Partikelfilter und ein SCR-System mit AdBlue<sup>®</sup>-Dosierung. Zur Russ- und Partikelmessung kommt ein AVL Smoke Meter zur Messung der Rauchzahl (FSN) und ein nach dem gravimetrischen Messprinzip funktionierender AVL Smart Sampler zur Anwendung. Zur Untersuchung von Einspritzung sowie Verbrennung und zur Erlangung kurbelwinkel aufgelöster Informationen über die Russkonzentration im Brennraum wird optische Messtechnik am Motor verwendet. Zwei optische Zugänge am Zylinderkopf ermöglichen die Aufnahme eines Endoskops mit Kamera und einer Beleuchtungseinheit.

Die Messergebnisse vom Forschungsmotor werden unter anderem als Vergleichsgrößen und zur Modellvalidierung für die 0D-1D und 3D-CFD Simulation herangezogen. Tabelle 1-2 veranschaulicht einen Blick auf Kurbeltrieb und Zylinderkopf des Einzylinder-Forschungsmotors.

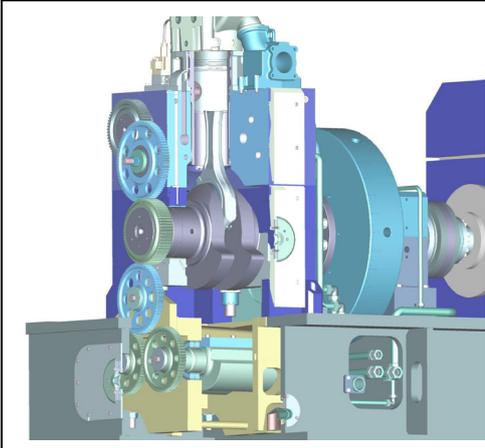
	Modell	SCE FM250
	Bohrung	250 mm
	Hub	320 mm
	Hubvolumen	15.7 Liter
	Nenn Drehzahl	1050 min <sup>-1</sup>
	Nennleistung	300 kW
	Zylinderanzahl	1

Tabelle 1-2: Technische Daten des FM250 Einzylinder-Forschungsmotors

Im Kurbelgehäuseunterteil ist noch ein Massenausgleich erster Ordnung integriert. Dieser treibt auch über ein Zahnradgetriebe die Nockenwelle an.

<sup>1</sup> Als Vollmotor wird ein Mehrzylindermotor bezeichnet

- Applikationen mittelschnellaufender Großdieselmotoren

Mittelschnellaufende Großdieselmotoren werden vor allem in Lokomotiven, Schiffen aber auch häufig im US amerikanischen Raum als Notstromaggregate eingesetzt. Die verwendeten Prüfzyklen für Großdieselmotoren sind Stationärzyklen. Die gesetzliche Prüfung erfolgt anhand von gewichteten Motorbetriebspunkten. Die zu prüfenden Betriebspunkte können diskret oder mit Rampen abgefahren werden. Je nach Motorapplikation kommen unterschiedliche Prüfzyklen zum Einsatz, welche die einzelnen Betriebspunkte nach unterschiedlichen Wichtungsfaktoren bewerten und aus deren Summe sich der gesetzliche Zykluswert bildet, siehe [7].

Bei Anwendung des Motors in Lokomotiven unterteilt sich das Kennfeld in acht Punkte und einen bzw. zwei Leerlaufpunkte. Für den Linienbetrieb kommt der Dynamic Brake Point hinzu. Bei diesem entspricht die Leistung jener Leistung, die notwendig ist, um sämtliche Nebenaggregate anzutreiben. Dies soll den Schubetrieb erfassen. Ein weiteres Einsatzgebiet des Motors ist die Generator- oder Marineanwendung. Deren Betriebspunkte unterscheiden sich nur hinsichtlich Last und Motordrehzahl. Abbildung 1-5 zeigt die Betriebspunkte der unterschiedlichen Motorapplikationen des FM250 Forschungsmotors mit den jeweils repräsentativen effektiven Mittelldrücken.

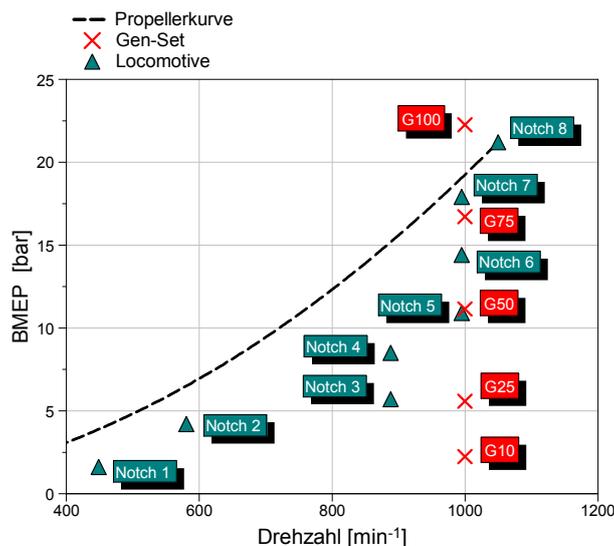


Abbildung 1-5: Betriebspunkte und Applikationen des FM250 Forschungsmotors

Da vor allem der Lokomotivzyklus mit 8 Messpunkten für die US Gesetzgebung vom besonderem Interesse ist, spielt dieser Zyklus eine wesentliche Rolle für die Entwicklungsarbeit am Prüfstand. Speziell der Volllastpunkt Notch8 ist bezüglich Kraftstoffverbrauch und zyklischer Emissionsgewichtung von hoher Relevanz und maßgebend für die Erreichung des Zykluswerts [7].

Für Marine- und Generatoranwendungen ist in erster Linie der Testzyklus nach ISO 8178-4 D2/E2 entscheidend. Deren Emissionsgewichtung wird anhand von nur vier repräsentativen Betriebspunkten durchgeführt [7]. Für die Entwicklungsarbeit am Motorprüfstand und der Simulation ist deshalb ein Volllast- und ein repräsentativer Teillastpunkt von primärer Bedeutung.

## 1.5 Zielsetzung

Um den Motorentwicklungsprozess auf Basis der Simulation vorausberechnen zu können, sind eine Vielzahl von Optimierungen und Anpassungen an der Simulationsmodellkette durchzuführen. In dieser Arbeit wurde die Prognosefähigkeit von Simulationsmodellen zur Darstellung von Verbrennung und Schadstoffbildung bewertet und mögliche Verbesserungspotentiale aufgezeigt.

Entscheidend für Großmotoren ist zukünftig auch die Emissionserfüllungsstrategie zur Erreichung von US EPA TIER4. Hierzu wurde in der Arbeit als Alternative zu konventionellen AGR-Lösungen das Potential eines diskontinuierlichen Systems mit der 1D-Ladungswechselrechnung untersucht. Durch den Einbau von zusätzlichen diskontinuierlichen Komponenten im Ladungswechselsystem soll eine Verbesserung des Betriebs aufgeladener Großmotoren erreicht werden.

Zur exakten Vorausberechnung des dieselmotorischen Verbrennungsprozesses ist eine einmalige Abstimmung von Simulationsmodellen erforderlich. Ein wesentliches Kriterium für die Modellabstimmung stellt der zeitliche Verlauf der Einspritzrate dar, um eine genaue Berechnung von Verbrennung aber auch Schadstoffbildung sicherzustellen. Deshalb wurden zwei Verfahren zur Bestimmung der Einspritzrate ausführlich untersucht und deren Auswirkungen auf die Simulation der dieselmotorischen Verbrennung für null- und dreidimensionalen Simulationsmodelle bewertet.

Weiters wurde in der Arbeit ein thermisches Stickoxidmodell für eine nulldimensionale Entwicklungsumgebung weiterentwickelt, da das eingesetzte Modell Schwächen in der Abbildung von AGR über der Motorlast aufweist. Zielsetzung der Modellentwicklung war, mit dem verbesserten Modell ein möglichst breites Emissionsniveau von hoher Genauigkeit darstellen zu können. Auch wurde eine Bewertung des Modells an einer Vielzahl von wichtigen Parametervariationen durchgeführt.

Neben der Untersuchung der Einflussgrößen auf die Brennratensimulation wurde durch umfangreiche Berechnungen die Prognosefähigkeit von null- und dreidimensionalen Verbrennungs- und Emissionsmodellen betrachtet. Die Bewertung der Modelle wurde anhand von wichtigen Entwicklungsparametern wie Einspritzdruck, AGR-Rate, Last und Drehzahl etc. für Voll- und Teillastpunkte durchgeführt.

## 2 Stand der Technik

Das Kapitel Stand der Technik beschreibt aktuelle und zukünftige Technologiepfade im Entwicklungsprozess von mittelschnelllaufenden Großdieselmotoren. Es zeigt den derzeitigen Stand der Motorenteknologie und die erforderlichen Maßnahmen zur Erreichung zukünftiger Emissionsgesetzgebungen. Weiters werden die Einschränkungen und Grenzen bekannter dieselmotorischer Verbrennungs- und Stickoxidmodelle beschrieben.

### 2.1 Brennverfahren für Großdieselmotoren

Der Hauptentwicklungsschwerpunkt bei Großdieselmotoren liegt in der Erfüllung der US EPA TIER 4 Abgasgesetzgebung. Für deren Erfüllung zeichnen sich zwei mögliche Pfade ab:

- Motorinterne Maßnahmen
- Abgasnachbehandlung

Durch verstärkte Grundlagenforschung in den vergangenen Jahren zu den Themen Abgasrückführung, Hochdruckeinspritzung, Aufladung und Abgasnachbehandlung gelang es, wesentliche Schritte zur Erfüllung zukünftiger Gesetzgebungen zu erreichen.

#### 2.1.1 Aktuelle Entwicklungen und Technologien

Die derzeit gültige Gesetzgebung (US EPA TIER 3 und IMO II) erlaubt nach wie vor eine rein innermotorische Realisierung der vom Gesetzgeber festgelegten Grenzwerte. Zukünftige Gesetzgebungen erfordern allerdings weit komplexere Maßnahmen, wie z.B. den Einsatz von AGR und/oder Abgasnachbehandlung. Als derzeitigen Stand der Technik kann bei mittelschnelllaufenden Großdieselmotoren die einstufige Abgasturboaufladung, die Common-Rail Einspritztechnologie und das Miller-Verfahren angesehen werden [7]. Für zukünftige Entwicklungsstrategien wird allerdings mit einer steigenden Komplexität hinsichtlich AGR-Transport, Einspritzsystem und Abgasturboaufladung gerechnet [18].

Die nachfolgend beschriebenen Technologieträger charakterisieren den derzeitigen Stand der Technik von mittelschnelllaufenden Großdieselmotoren und geben auch einen Überblick über zukünftige Herausforderungen.

- Einspritzung

Eine der Schlüsseltechnologien zur Erreichung aktueller und zukünftiger Emissionsgesetzgebungen für Partikel ist die Einspritztechnologie. Neben der Düsengeometrie, spielt die Brennraum- und Muldenform aber auch der Einspritzdruck eine große Rolle für die Kraftstoffaufbereitung. Durch den Einsatz moderner Common-Railsysteme ist es möglich den Einspritzdruck unabhängig von der Motordrehzahl für jeden Lastpunkt bedarfsgerecht anzupassen. Beim PLD-System wird der maximale Einspritzdruck jedoch von der Nockendrehzahl und Lage bestimmt, eine Mehrfacheinspritzung ist daher nicht möglich.

Moderne Common-Railsysteme erlauben jedoch mehrere Einspritzvorgänge pro Arbeitsspiel. Typische Injektoren wie sie bei mittelschnelllaufenden Großdieselmotoren zum Einsatz kommen erlauben vier Einspritzvorgänge pro Arbeitsspiel. Eine emissionsoptimierte Darstellung des Verbrennungsprozesses ist dadurch möglich. Abbildung 2-1 zeigt Nadelhub- und Brennverläufe für Einfach- und Mehrfacheinspritzung eines Lokomotiven-Volllastpunktes.

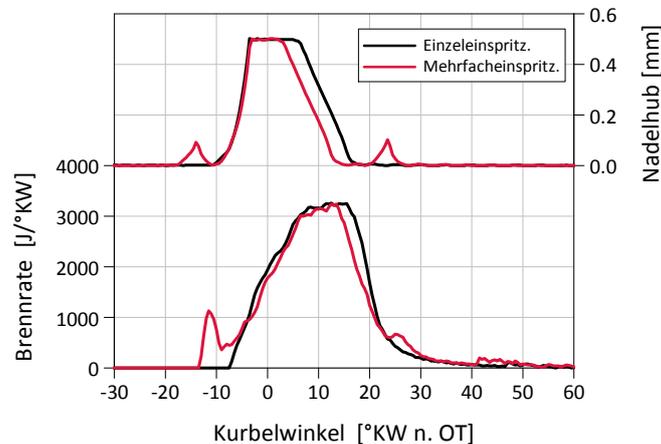


Abbildung 2-1: Gegenüberstellung von Einfach- vs. Mehrfacheinspritzung für Notch8

Aus der Abbildung ist erkennbar, dass bei gleicher Lage der Haupteinspritzung die Schwerpunktlage des Brennverlaufs mit applizierter Voreinspritzung sich nach früh zugunsten eines besseren Kraftstoffverbrauchs verschiebt. Ein sanftes Anbrennen mit gleichzeitiger Verringerung der vorgemischten Verbrennung trägt auch dazu bei die Stickoxidbildung gering zu halten. Mit einer Nacheinspritzung kann die Russoxidation angekurbelt und die Partikelemissionen abgesenkt werden [12]. Auch am mittelschnelllaufenden Schiffsdieselmotor konnte durch die Kombination aus hohen Einspritzdrücken und Nacheinspritzung ein deutliches Potential zur Absenkung der Partikelemissionen festgestellt werden [10][11]. Dabei kommt der Notwendigkeit der Einspritzung von Schweröl mit Common-Rail Systemen und der Generierung von Einspritzdrücken von mehr als 2000 bar eine besondere Bedeutung zu [19].

- Ventilsteuerzeit

Der Ladungswechsel wird durch Ventile gesteuert, die im Zylinderkopf angeordnet sind. Bei Großdieselmotoren werden neben füllungsoptimierten Steuerzeiten vermehrt Miller-Steuerzeiten verwendet. Der Vorteil des Miller-Verfahrens ist eine Reduktion von Stickoxid und auch des Verbrauchs [13]. Das Verfahren ermöglicht eine Verringerung von Stickoxid durch eine Senkung der Verdichtungsendtemperatur. Dies wird durch ein früheres Schließen des Einlassventils vor dem unteren Totpunkt erreicht (vgl. Abbildung 2-2).

Durch das frühere Schließen des Einlassventils vor dem unteren Totpunkt erfolgt eine Expansion und anschließende Kompression der Ladungsmasse im Zylinder. Wie aus Abbildung 2-2 ersichtlich, wird im Vergleich zur konventionellen Steuerzeit beim Miller-Verfahren der effektive Verdichtungsweg verringert und dadurch die Prozesstemperatur gesenkt. Durch diese Maßnahme sinkt aber die angesaugte Luftmasse, was eine Erhöhung des Ladedrucks notwendig macht. Der Vorteil der Temperaturabnahme geht durch den erhöhten Ladedruck logischerweise verloren. Die Funktionsweise des Miller-

Verfahrens setzt für die notwendige Temperaturabsenkung einen Ladeluftkühler voraus, da ein Teil der Kompressionsarbeit auf den Lader entfällt [25]. Für die Erfüllung älterer Emissionsgesetzgebungen (TIER 2) stellt deshalb das Miller-Verfahren eine attraktive Möglichkeit zur innermotorischen  $\text{NO}_x$ -Reduzierung dar [15].

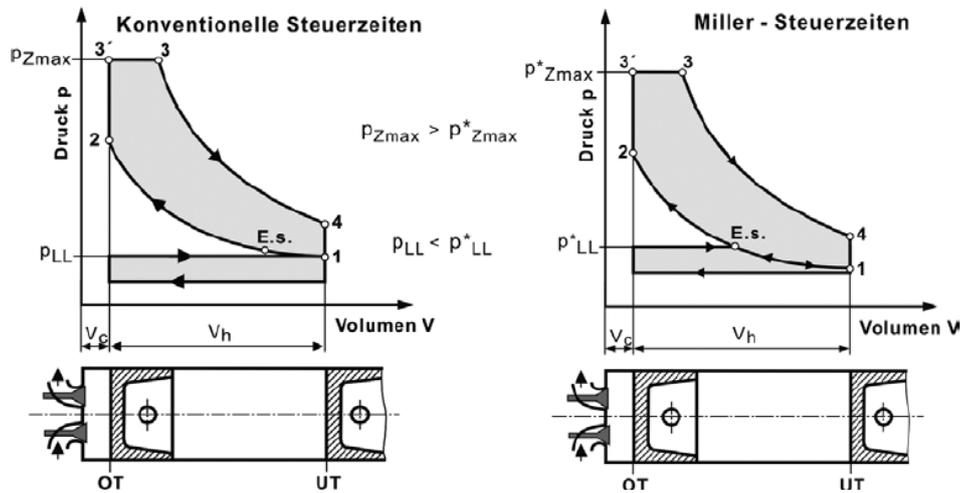


Abbildung 2-2: Prinzip des Miller-Verfahrens [9]

Untersuchungen wie jene von *Rauter* [12] bestätigten, dass eine Kombination aus Miller-Verfahren und externer gekühlte AGR ein potentieller Lösungsansatz zur Erreichung von TIER 4 für mittelschnelllaufende Großdieselmotoren darstellt. Nachteile im Rauchwert können zum überwiegenden Teil durch gesteigerte Einspritzdrücke und optimierte Einspritzstrategien kompensiert werden.

Wie *Rauter* versuchte auch *Pemp* [13] die zukünftige TIER 4 Emissionsgesetzgebung innermotorisch mit Hilfe einer „scharfen“ Miller-Steuerzeit, Abgasrückführung und Hochdruckeinspritzung zu lösen. Durch die Kombination aus Miller-Verfahren und einem niedrigen Verdichtungsverhältnis gelang es über eine Verlängerung des Zündverzugs und gleichzeitiger Applizierung von AGR Vorteile in den Schadstoffemissionen und im Verbrauch zu generieren. Die Realisierung des Brennverfahrens am Vollmotor hängt aber maßgeblich von der Leistungsfähigkeit des Turboladers und vom AGR-Konzept ab.

Auch *Weisser et al.* [14] testete das Potential von Miller-Verfahren in Kombination mit SCR-Technologie für Vier- und Zweitakt Großmotoren. Schwierigkeiten zeigten sich vor allem im Teillastbereich, da die vom Miller-Verfahren hervorgerufenen niedrigeren Abgastemperaturen das SCR-Verfahren deutlich einschränken. Das SCR-System bietet allerdings die Möglichkeit, den Motor in einem verbrauchsgünstigeren und auch raucharmen Kennfeldbereich zu betreiben. Eine Applizierung von AGR- oder SCR-Technik wird aber für die zukünftige Gesetzgebung als erforderlich gesehen.

- Aufladung

Der durch das Miller-Verfahren hervorgerufene Bedarf nach mehr Ladedruck stellt immer höhere Anforderungen an die Abgasturboaufladung für Großdieselmotoren. Die zukünftigen Anforderungen zur Steigerung von Leistung und Wirkungsgrad bedürfen aber einer Verringerung der Schadstoffkomponenten der unvollständigen Verbrennung. Die ein- und zweistufige Abgasturboaufladung stellt deshalb eine Schlüsseltechnologie zur Erreichung zukünftiger Gesetzgebungen dar [18].

Vor allem die Kombination aus Miller-Verfahren und Abgasrückführung steigert zusätzlich die Anforderungen an die Aufladetechnik. Da mit AGR die Sauerstoffkonzentration im Zylinder sinkt, ein hohes Luftverhältnis aber entscheidend für einen hohen Wirkungsgrad [20] und eine Reduktion der Partikel ist [13], hängt die Erreichung zukünftiger Gesetzgebungen im großen Ausmaß von der Aufladetechnologie ab.

Beim Einsatz der ein- und zweistufigen Aufladetechnologie spielt die Auslegung der Turbine eine entscheidende Rolle. Die Turbine muss nicht nur die Antriebsleistung für den Kompressor zur Verfügung stellen, sondern auch einen möglichst geringen Abgasgegendruck erzeugen, um Ladungswechselarbeit und Verbrauch zu minimieren [46]. Die derzeitige Grenze der einstufigen Abgasturboaufladung liegt je nach Applikation bei Verdichterdruckverhältnissen zwischen 5.2 und 5.7 [18]. Eine dementsprechende Steigerung des Verdichterdruckverhältnis und des Aufladewirkungsgrad kann mit zweistufiger Abgasturboaufladung erreicht werden (vgl. Abbildung 2-3). Für Großdieselmotoren empfiehlt sich eine Auslegung der Niederdruckverdichters im Vollastpunkt für ein Druckverhältnis von etwa 3.0 bis 3.2. Die Verdichterhochdruckstufe hat einen optimalen Wirkungsgrad für Druckverhältnisse um etwa 2.2 [18].

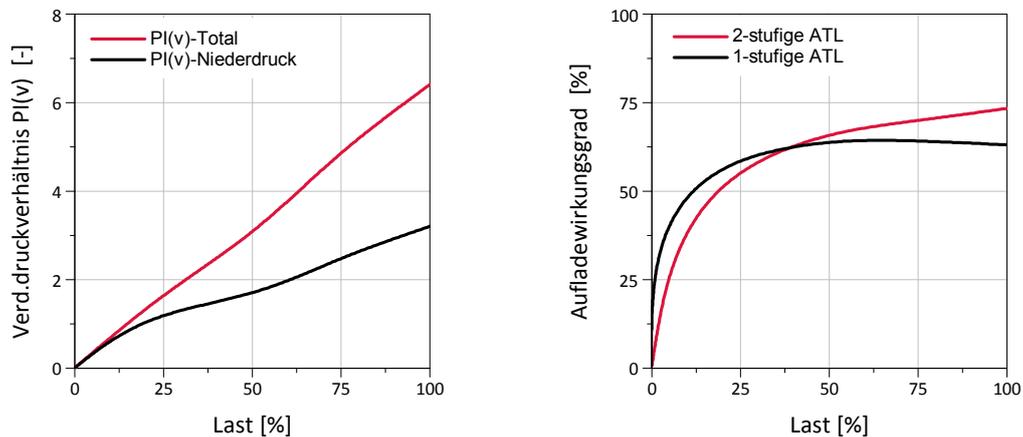


Abbildung 2-3: Druckverhältnis und Wirkungsgrad für ein- und zweistufige Aufladung eines mittelschnelllaufenden Großdieselmotors

Auch Autoren wie *Tinschmann et al.* [15] bekräftigen die Notwendigkeit von höheren Lade- und Aufladewirkungsgraden, um mittelschnelllaufende Großdieselmotoren in Kombination mit dem Miller-Verfahren im Verbrauch und Emissionsniveau zu verbessern. Auch für Großgasmotoren stellt die zweistufige Aufladung ein weiteres Potential zur Verbesserung des Wirkungsgrads von Magermotorkonzepten dar [16]. Durch das gesteigerte Verbrennungsluftverhältnis ist eine Verbesserung bei Verbrauch und Emissionsniveau möglich und eröffnet auch zusätzliche Variabilitäten für Miller- und Atkinson-Steuerzeit. Das Ladedruckpotential der zweistufigen Aufladung ermöglicht auch eine Vergrößerung des nutzbaren Kennfeldbereichs des Gasmotorbetriebs.

Die Erfüllung zukünftiger Gesetzgebungen setzt eine Kombination der eben beschriebenen Technologiepfade und den Einsatz eines applikationsabhängigen Emissionserfüllungskonzepts für zukünftige Gesetzgebungen voraus [19]. Auf die für Großmotoren in Frage kommenden Emissionserfüllungskonzepte wird im nächsten Abschnitt eingegangen.

## 2.1.2 Emissionserfüllungsstrategien

Für die Erfüllung zukünftiger Emissionslimits sind zwei Technologiepfade denkbar. Einerseits die innermotorische Stickoxidreduzierung mittels Abgasrückführung mit gleichzeitiger Reduktion der Partikelemissionen durch Abgasnachbehandlung, oder die verbrauchs- und russoptimale Einstellung des Motors mit anschließender katalytischer Reduktion der Stickoxidemissionen.

- Selektive katalytische Reduktion (SCR)

Die SCR-Technik ist eine häufig angewandte Technologie zur Reduktion von Stickoxid. Das bereits in den 1970er Jahren in Kraftwerken eingesetzte Verfahren wird zunehmend durch die Verschärfung der Gesetzgebungen auch für Großmotoren ein Thema. Bei der selektiven katalytischen Reaktion werden Stickoxide mittels eines Reduktionsmittel reduziert. Als Reduktionsmittel wird meist Ammoniak ( $\text{NH}_3$ ) verwendet. Da Ammoniak giftig und schwierig zu transportieren ist, kommen alternative Reduktionsmittel wie wässrige Harnstofflösungen, auch unter dem Handelsnamen AdBlue<sup>®</sup> bekannt, zum Einsatz. Abbildung 2-4 zeigt die erforderliche Systemarchitektur für ein SCR-System. Ausgehend von einem Oxidationskatalysator, welcher NO in  $\text{NO}_2$  oxidiert und dem für die Ammoniak-Freisetzung notwendigen Harnstoff-Dosiersystem, folgt der eigentliche SCR-Katalysator. Für die Vermeidung des Ammoniak-Schlupfs wird dem System noch ein  $\text{NH}_3$ -Katalysator nachgeschaltet.

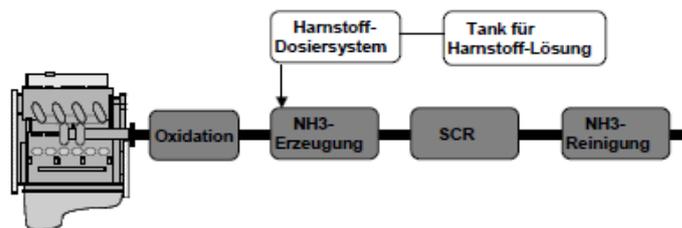


Abbildung 2-4: Funktionseinheiten des SCR-Verfahrens [67]

Um im SCR Katalysator  $\text{NH}_3$  zur Verfügung zu haben, wird die Harnstofflösung in das heiße Abgas eingespritzt. Dort kommt es zur Umwandlung der wässrigen Lösung in Ammoniak und Isocyanäure. Die Umwandlung von AdBlue<sup>®</sup> beginnt bei 160 Grad Celsius. Im Katalysator werden die Stickoxide durch folgende Reaktionen reduziert:



Diese Bruttoreaktionen werden aufgrund der Reaktionsgeschwindigkeit in der Literatur mit Standard-SCR-Reaktion (Gleichung (2-1)), schnelle SCR-Reaktion (Gleichung(2-2)) und langsame SCR-Reaktion (Gleichung (2-3)) bezeichnet. Die schnelle SCR-Reaktion erfordert das Vorhandensein von  $\text{NO}_2$  und verbessert das Umsatzverhalten bei niedrigen Abgastemperaturen [7]. Aufgrund des zusätzlichen Platzbedarfs versucht man vor allem für Lokomotiven die Emissionsgrenzwerte weiterhin innermotorisch mit AGR zu lösen.

- Abgasrückführung (AGR)

AGR kommt zum Einsatz, um Stickoxid zu reduzieren und eine kostenintensive Abgasnachbehandlung zu vermeiden. In diesem Abschnitt werden die Wirkung der AGR und mögliche AGR-Systemlösungen diskutiert. Weiters wird in diesem Kapitel das Potential eines diskontinuierlichen AGR-Systems hinsichtlich des AGR-Transports im Vergleich zu konventionellen Konzepten bewertet.

Anhand der nachfolgenden Ausführungen soll vorerst die Wirkung von AGR besprochen werden. Der vereinfachte Wirkungsgrad des vollkommenen Motors [20] hängt für ein vorgegebenes Verdichtungsverhältnis nur vom Isentropenexponenten ab. Den Zusammenhang dieser Größen für Gleichraumverbrennung zeigt Gleichung (2-4).

$$\eta_{th,v} = 1 - \frac{1}{\varepsilon^{\kappa-1}} \quad (2-4)$$

Da der Isentropenexponent eine Funktion aus Stoffwerten und der Temperatur darstellt und AGR eine Abnahme der Verbrennungstemperatur hervorruft, sinkt der Wirkungsgrad des vollkommenen Motors. Die Wirkungsweise der Abgasrückführung lässt sich nach [12] und [35] auf drei Haupteffekte zurückführen. Einerseits bewirkt AGR eine Verringerung der Sauerstoffkonzentration und damit eine Verlangsamung der Verbrennung. Das sich daraus ergebende Potential zur Minimierung von Stickoxid durch die Senkung der Sauerstoffkonzentration zeigt Abbildung 2-5.

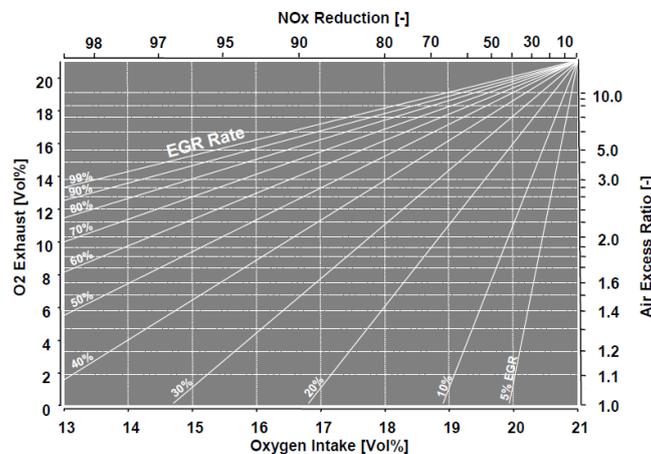


Abbildung 2-5: Korrelation für Lambda, AGR-Rate, O<sub>2</sub>-Konzentration und NOx [67]

Andererseits bewirkt die AGR eine Substitution von Sauerstoffmolekülen durch Inertgaskomponenten wie CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>O, deren Molekülstruktur sich vorwiegend aus 3-atomigen Gasen zusammensetzt. 3-atomige Gase weisen gegenüber der reinen Ladung eine höhere spezifische Wärmekapazität und einen niedrigeren Isentropenexponenten auf [36]. Der Haupteffekt der AGR beim Dieselmotor ist allerdings durch den Masseneffekt begründet [5]. Dieser Effekt kommt dadurch zustande, dass durch die verringerte Sauerstoffkonzentration im Zylinder von der Flamme mehr Ladungsmasse erwärmt werden muss, damit die Diffusionsverbrennung lokal mit einem stöchiometrischen Luftverhältnis erfolgen kann.

### 2.1.3 Abgasrückführungskonzepte für Großmotoren

- Konventionelle AGR-Konzepte

Für den Transport von Abgas bei Verbrennungsmotoren von der Auslass- zur Saugseite können technisch viele Konzepte in Betracht gezogen werden. Die hohen Turboladerwirkungsgrade und das positive Spülgefälle setzen allerdings unterstützende Systeme voraus. Diese Systeme verschlechtern im allgemeinen Ladungswechsel und Wirkungsgrad des Motors [4]. Für mittelschnelllaufende Großdieselmotoren wird externe gekühlte Hochdruck-AGR und das Miller-Verfahren als eine Möglichkeit gesehen, um zukünftige Emissionsszenarien erfüllen zu können [44]. Infolgedessen wird nachfolgend auf die Möglichkeiten der AGR-Generierung bei mittelschnelllaufenden Großdieselmotoren eingegangen und eine Bewertung der Konzepte durchgeführt.

Aufgrund der hohen Diversifikation und Applikationsvielfalt im Großmotorenbau gestaltet sich die Entwicklung einer allgemein gültigen AGR-Systemlösung schwierig und verlangt eine Anpassung an Markt und Kunden [18]. In dieser Arbeit werden daher mehrere konventionelle und eine alternative AGR-Lösung vorgestellt. Die Funktion der einzelnen AGR-Konzepte wurde anhand der thermodynamischen Ladungswechselrechnung für einen V12-Großmotor mit einstufiger Abgasturboaufladung untersucht und bewertet.

Ansichts der Vielzahl von möglichen AGR-Konzepten für Großmotoren werden an dieser Stelle nur Konzepte mit der größten Aussicht auf Realisierung in Betracht gezogen [18]. Abbildung 2-6 zeigt AGR-Konzepte für einen mechanisch betriebenen Hoch- und Niederdruckkompressor, einen Hochdruck AGR-Lader und ein Spenderzylindersystem für einen mittelschnelllaufenden Großdieselmotor. Die Bewertung der einzelnen Konzepte wurde für Lastpunkte einer Lokomotiven-Applikation durchgeführt.

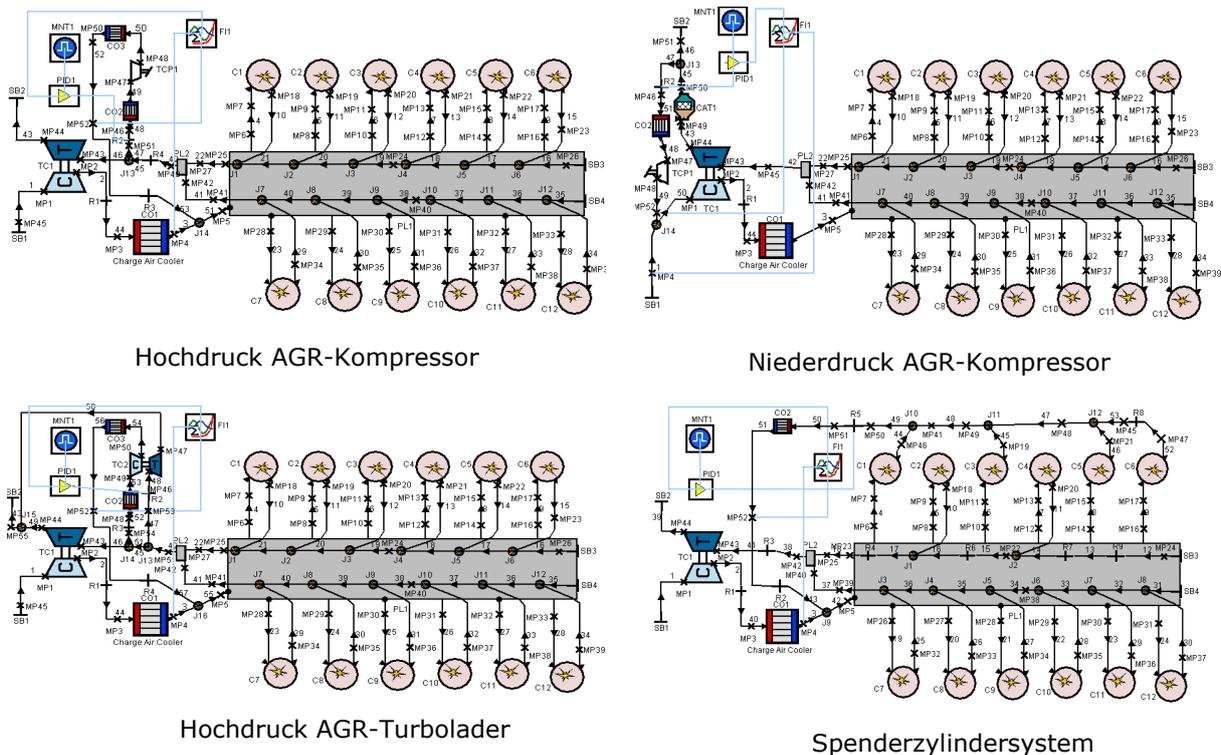


Abbildung 2-6: Potentielle AGR-Systemlösungen für mittelschnelllaufende Großmotoren

Wie Abbildung 2-6 zu entnehmen ist, eröffnet die AGR-Generierung mit einem *mechanisch angetriebenen Kompressor* die Möglichkeit zur Bereitstellung hoher AGR-Raten - da der mechanische Antrieb unabhängig vom Abgasmassenstrom ist. Der Einsatz eines derartigen Konzepts erhöht aber die Systemkomplexität, da ein Getriebe zwischen Kurbelwelle und Kompressor erforderlich wird. Erfolgt die Aufbringung der erforderlichen Antriebsleistung des Kompressors vom Verbrennungsmotor, ist aber mit erheblichen Verbrauchsnachteilen zu rechnen (vgl. Abbildung 2-10).

Beim *Niederdruck AGR-Konzept* wird das Abgas nach einem allfällig notwendigen Abgasnachbehandlungssystem (DOC, DPF) entnommen und dem Frischluftpfad vor dem Kompressor zugeführt. Das rückgeführte Abgas muss jedenfalls gereinigt werden, um verschmutzende und korrosive Einwirkungen diverser Abgasbestandteile auf die Komponenten des Abgasturboladers zu vermeiden. Insbesondere die im Dieselabgas enthaltenen Partikel (Russ- und Schmierölbestandteile) und Schwefelanteile können durch Kondensation zur äußerst kritischen Kühler-Verschmutzung führen.

Die Turbine und der Verdichter des *AGR-Turboladers* werden hochdruckseitig mit heißen Abgas beaufschlagt. Ein Teil des Abgases expandiert über die Turbine auf Umgebungsdruck und ermöglicht damit den Antrieb des Verdichters. Durch die doppelte Entnahme von Abgas verringert sich der Massenstrom für den Niederdruckturbolader und führt zu einem Anstieg der Ladungswechselverluste (vgl. Abbildung 2-10). Die Realisierung des Konzepts setzt aber die Bereitstellung geeigneter Turbolader durch die Zulieferindustrie voraus um die erforderliche Standfestigkeit zu gewährleisten.

Das *Spenderzylinderkonzept* beruht auf einer Erhöhung des Abgasgedrucks durch Klappen für einzelne Zylinder oder komplette Zylinderbänke entsprechend der notwendigen AGR-Rate. Besonders geeignet ist dieses Konzept wegen seiner Kompaktheit bei Motoranwendungen mit beengten Platzverhältnissen (z.B. Lokomotiven) sowie bei Motoren mit schlechteren Turboladerwirkungsgraden. Die durch das Konzept verhältnismäßig kleine Erhöhung des Abgasgedrucks zeigt überschaubare Nachteile für Ladungswechsel und Kraftstoffverbrauch (vgl. Abbildung 2-10). Die Applizierung des Systems setzt allerdings eine ausgefeilte Regelstrategie und die Berücksichtigung von Patentansprüchen seitens namhafter Hersteller voraus.

Die Beurteilung der unterschiedlichen Konzepte hinsichtlich Ladungswechsel und Kraftstoffverbrauch ist in Kapitel „diskontinuierliche Systeme“ zu finden. Eine noch exaktere Beschreibung von Funktionsweise und der Vor- und Nachteile von AGR-Konzepten findet sich bei *Fölzer et al.* [18].

- Diskontinuierliches AGR

Um die durch den AGR-Transport auftretenden Wirkungsgradnachteile kompensieren zu können [4], bedarf es einer innovativen Strategie. Eine Möglichkeit stellt die diskontinuierliche Aufteilung des Abgasmassenstroms in die heiße Blow-Down- und kältere Ausschleibephase dar. Die Aufteilung der Masse in heißes Turbinenabgas und kaltes AGR ermöglicht Verbesserungen im Ladungswechsel. Die Verbesserung im Ladungswechsel kommt dadurch zu Stande, da ein Teil des Abgases nicht gegen den Gegendruck der Turbine, sondern beispielsweise auf den Umgebungsdruck expandiert. Die Folge ist eine deutlich verringerte Ausschleibearbeit des Kolben [46]. Abbildung 2-7 zeigt für einen Seiliger-Kreisprozess das Prinzip der diskontinuierlichen Aufteilung der Abgasmasse in Blow-Down-Energie (5-8-9) und Ausschleibeenergie (13-9-10-11).

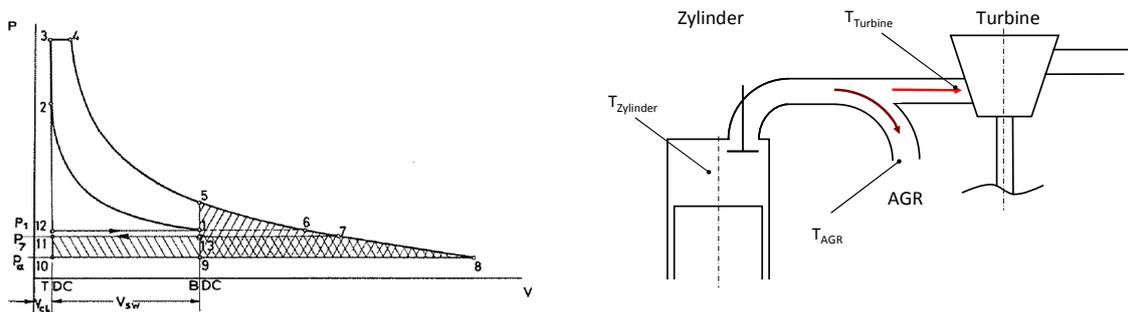


Abbildung 2-7: Prinzip der diskontinuierlichen Aufteilung des Abgasmassenstroms

In der vorliegenden Arbeit erfolgte die Aufteilung der Abgasmasse durch die Integration eines diskontinuierlichen Verteilers im Abgassystem, um Blow-Down und Ausschleibephase getrennt voneinander zu betrachten (vgl. Abbildung 2-8). Der diskontinuierliche Verteiler lässt sich demnach als eine Art Wärmeverteiler interpretieren d.h. warmes Abgas kommt auf die Turbine und kälteres Abgas wird als AGR verwendet. Die Realisierung des diskontinuierlichen Systems am Großmotor setzt jedoch den Umbau des Aufladesystems voraus bzw. den Einbau einer Nutzturbine zur Anhebung des Abgasgegendrucks. Eine weitere Möglichkeit zur Separierung des Abgasmassenstroms wurde bereits erfolgreich durch getrennte Abgaskrümmen am NFZ [47] und auch am Großmotoren realisiert [48]. In diesem Fall basiert der Aufbau des diskontinuierlichen Verteilers und dessen Funktionsweise auf einer Idee nach *Melchior* [45].

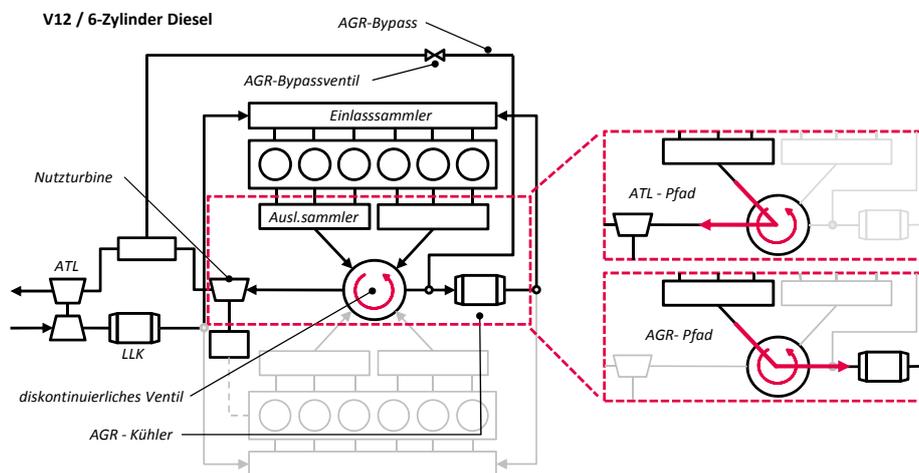


Abbildung 2-8: Funktionsweise des diskontinuierlichen AGR-Systems

Das zentrale Element der Separierung des Abgasmassenstroms stellt das diskontinuierliche Ventil dar, welches zwischen Auslasssammler und dem weiteren Abgassystem angeordnet ist. Der Verteiler ist zur Auslassphase der Zylinder synchronisiert. Er schaltet also zwölfmal pro Zyklus. Ein AGR-Bypass gibt zusätzliche Freiheiten, die AGR-Rate zu regeln. Der V12 Motor ist mit einer Nutzturbine ausgestattet, über die nicht nur das vorhandene Druckgefälle, sondern auch das mögliche Rekuperationspotential der Turbine festgelegt wird.

Abbildung 2-9 zeigt die Vorgänge während eines Arbeitsspiels beispielhaft für einen Volllastpunkt. Wenn das Auslassventil öffnet, ist nur der ATL-Pfad geöffnet. Das Ausströmen der Zylinderladung erfolgt gegen den durch Nutzturbine und Turbolader bestimmten Gegendruck. Wenn der diskontinuierliche Verteiler den AGR-Pfad öffnet, steigt der Druck auf das Niveau des Ladedrucks - erhöht um den Druckverlust der AGR-Strecke, der hier 250 mbar beträgt. Gegen diesen Druck schiebt der Kolben des Zylinders die restliche Zylinderladung als AGR aus. An den schwarz und rot schraffierten Flächen ist eindeutig der für ATL und AGR generierte Massenstrom erkennbar. Für die durchgeführte Untersuchung wurde eine AGR-Rate von 30% eingestellt. Aufgrund der Funktionsweise stellt das Konzept eine mögliche Alternative zu konventionellen AGR-Lösungen dar.

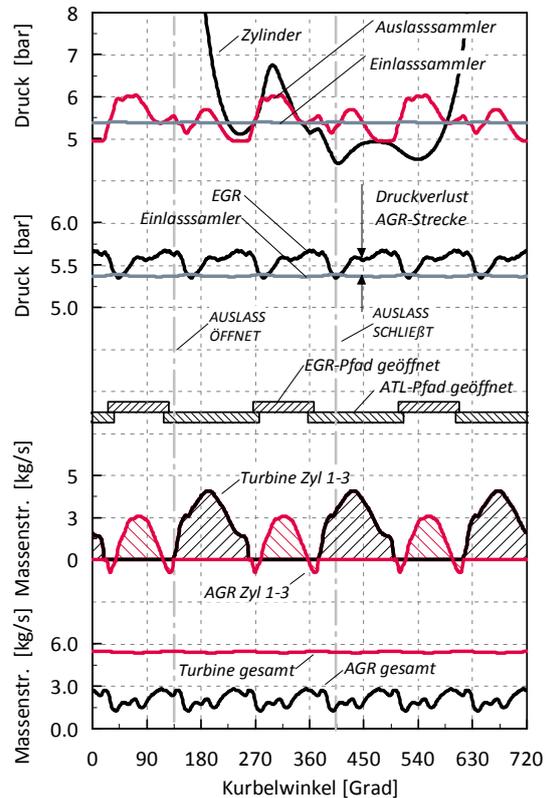


Abbildung 2-9: Volllastdruckkurven

Einen Vergleich des diskontinuierlichen Systems für Verbrauch und Wirkungsgrad mit den im Kapitel zuvor beschriebenen AGR-Transportsystemen zeigt Abbildung 2-10. Die Änderungen im Verbrauch sind auf den Basismotor ohne Abgasrückführung bezogen. Für den Hoch- und Niederdruck-AGR-Kompressor ergeben sich infolge der aufzubringenden Antriebsleistungen Unterschiede zwischen indiziertem und effektivem Verbrauch. Beim diskontinuierlichen System ergeben sich die Unterschiede im Verbrauch durch die Rekuperation der Nutzturbinenarbeit auf die Kurbelwelle.

Aus dem linken Diagramm in Abbildung 2-10 ist ersichtlich, dass das diskontinuierliche System in etwa eine Verdoppelung der Ladungswechselverluste im Vergleich zu Spenderzylinder und AGR-Lader aufweist. Die mechanische Rekuperation erlaubt jedoch mit der gewählten Turbinenauslegung eine verbrauchsneutrale AGR. Eine Verbesserung des effektiven Wirkungsgrades um 2-4% ist damit realistisch. Im Gegensatz dazu muss festgehalten werden, dass ein mechanischer Kompressor aufgrund des Verbrauchsnachteils und des erforderlichen Getriebes als AGR-Lösung kaum in Frage kommt. Einen möglichen Kompromiss stellt ein Spenderzylinder oder AGR-Lader dar, jedoch sei auf Patentansprüche und komplizierte Regelstrategien hingewiesen.

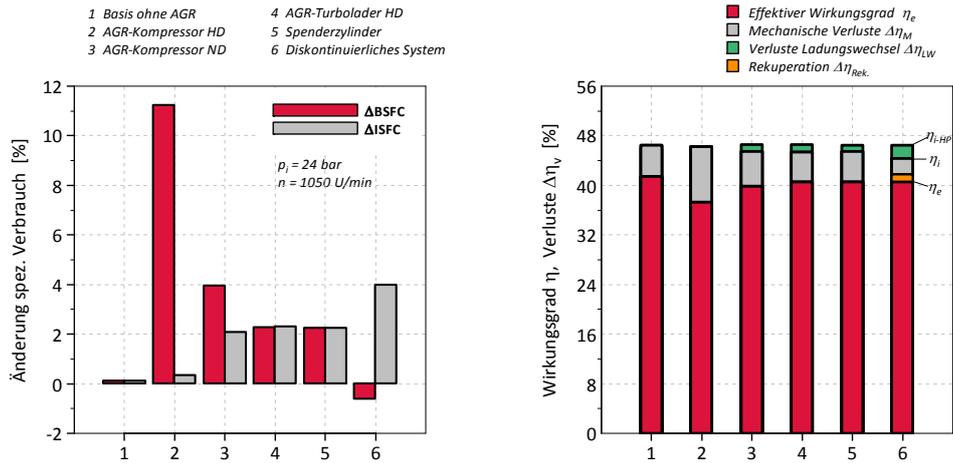


Abbildung 2-10: Verbrauch und Wirkungsgrad von AGR-Konzepten für Vollast

Um das Potential des diskontinuierlichen Systems anhand von Betriebspunkten für die mittlere und untere Teillast zu demonstrieren, wurde dessen Potential gegenüber einen Spenderzylinder- und AGR-Lader-Konzept verglichen. Abbildung 2-11 zeigt für gleiche Randbedingungen die Unterschiede für effektiven Verbrauch, Ladungswechsel und AGR-Kühlleistung.

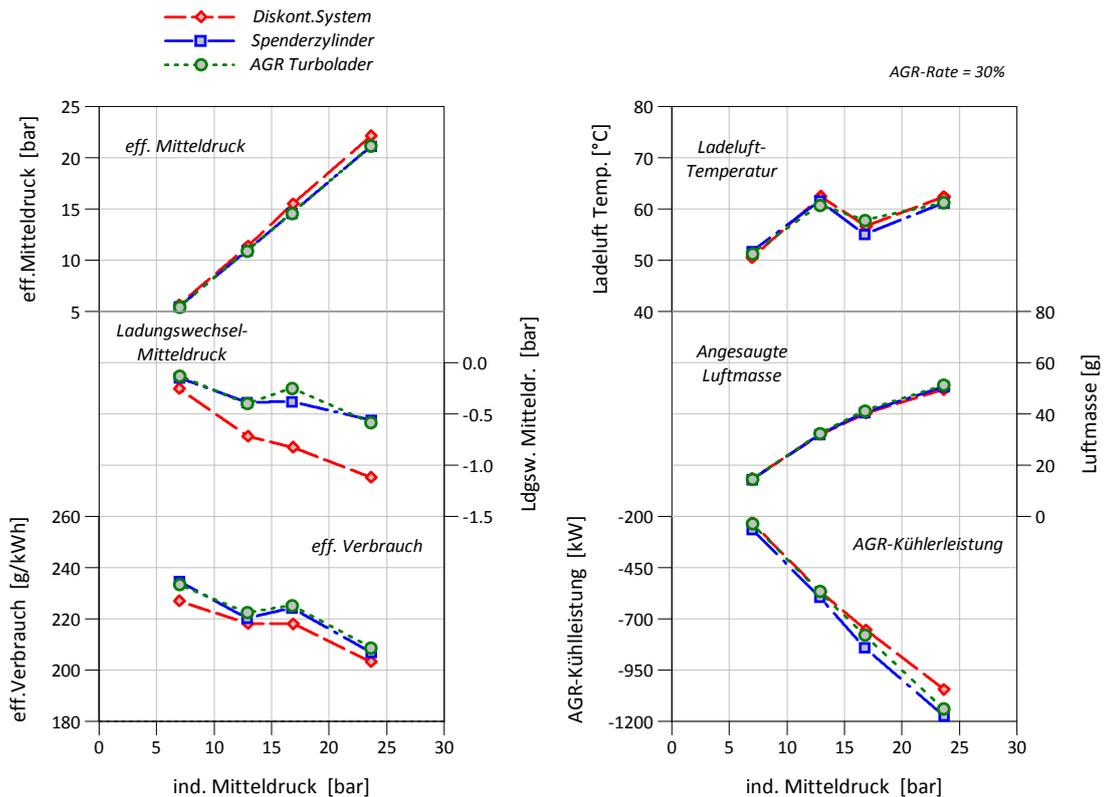


Abbildung 2-11: Vergleich diskontinuierliches AGR mit konventionellem AGR-Systemen

Generell fällt auf, dass für die betrachteten Betriebspunkte das diskontinuierliche System deutliche Vorteile für Verbrauch und AGR-Kühlleistung gegenüber Spenderzylinder und AGR-Lader birgt. Offen und herausfordernd bleibt allerdings die konstruktive Umsetzung eines derartigen Systems, da der rotierende Verteiler der Funktionsweise eines Wankelmotors ähnelt und somit einen Serieneinsatz doch deutlich in Frage stellt.

## 2.2 Simulationsmodelle zur Brennverfahrensoptimierung

Bei der Entwicklung von Großdieselmotoren erzwingen die steigenden Anforderungen von Seiten der Abgasgesetzgebung und des Wettbewerbs immer höhere Anstrengungen hinsichtlich der Prognose der Emissionen und des Wirkungsgrades mittels der Simulation. Um eine rasche und effiziente Voroptimierung von Verbrennungskonzepten durchführen zu können, ist der Einsatz von zuverlässigen Simulationswerkzeugen erforderlich. Nach einer allgemeinen Einführung und Modellgliederung wird in dem Kapitel auf die Schwächen von bekannten dieselmotorischen Brennraten- und Stickoxidmodellen eingegangen und daraus der Bedarf für zukünftige Neuentwicklungen und Verbesserungen abgeleitet.

### 2.2.1 Einteilung

Die Berechnung und Prognose von physikalischen Gesetzmäßigkeiten anhand von kalibrierten Rechenmodellen wird als Simulation bezeichnet. Für die Berechnung des dieselmotorischen Verbrennungsprozesses steht eine Vielzahl von Modellen zur Verfügung, welche sich hinsichtlich Komplexität und Detaillierungsgrad deutlich unterscheiden. Die grundsätzliche Gliederung der Modelle nach deren Struktur und Aufbau lässt sich einteilen in:

- *Phänomenologische Modelle*
- *Physikalische Modelle*
- *Statistische Modelle*

Ein *phänomenologisches Modell* beschreibt physikalischen Größen mit Hilfe von empirischen Funktionen. Die Anwendung von phänomenologischen Modellen bezieht sich auf relevante Variationsrechnungen und setzt die einmalige Modellkalibrierung anhand von mehreren Betriebspunkten voraus [20]. Die Ermittlung und Anpassung von Modellkonstanten stellt aber einen limitierenden und zeitintensiven Faktor eines phänomenologischen Modells dar. Für die Parameterbestimmung werden deshalb oft spezielle Optimierungsalgorithmen eingesetzt [21].

*Physikalische Modelle* beruhen hingegen auf der exakten mathematischen Formulierung grundlegender physikalischer Zusammenhänge und besitzen in der Regel allgemeine Gültigkeit. Der Einsatz eines physikalischen Modells erfordert allerdings für die Verbrennungssimulation eine räumliche und zeitliche Diskretisierung des Strömungsfeldes im Brennraum und die Auflösung von lokalen Größen [20]. Da die Berechnung motorischer Verbrennungsprozesse mit physikalischen Modellen deutlich aufwendiger ist, stellt deren Einsatz immer einen Kompromiss zwischen notwendigem Detaillierungsgrad und erforderlicher Rechenzeit dar.

Mit *statistischen Modellen* kann ebenfalls eine Beschreibung motorrelevanter Größen durchgeführt werden. Derartige Modelle setzen allerdings einen hohen Kalibrieraufwand voraus und bedürfen einer Methode, welche die Erfassung von Parametern in einem multidimensionalen Versuchsraum zulässt. Die Festlegung der notwendigen Zusammenhänge und die Planung des Experiments wird deshalb immer mehr anhand von statistischen Modellen mittels der DoE-Methode durchgeführt [22].

Um Verbrennungsprozesse möglichst rasch und effizient vorausberechnen zu können, strebt die Forschung nach wie vor eine Verbesserung und Weiterentwicklung von phänomenologischen Modellen an. Unter Berücksichtigung von örtlichen Abhängigkeiten im Modell wird ein noch höherer Detaillierungsgrad und eine allgemeine Gültigkeit erreicht. *Phänomenologische Modelle* werden deshalb nach Detaillierungsgrad und Komplexität weiter unterteilt in [23]:

- *Nulldimensionale Modelle*
- *Quasidimensionale Modelle*
- *Ein- und mehrdimensionale Modelle*

Bei *nulldimensionalen Modellen* wird im Gegensatz zu ein- oder mehrdimensionalen Modellen keine explizite Abhängigkeit örtlicher Variablen berücksichtigt, sondern nur deren Zeitabhängigkeit. Die Berechnung der Brennrate basiert auf der Lösung des 1. Hauptsatzes der Thermodynamik. Die Beschreibung der Zylinderladung als eine homogene Zone bei gleichzeitiger Durchmischung von Verbranntem und Unverbranntem bezeichnet man als Einzonenmodell, mehrere Zonen hingegen charakterisieren Zwei- oder Mehrzonenmodelle. Für eine globale energetische Betrachtung des Motorprozesses ist die Modellierung mit nur einer einzigen homogenen Zone ausreichend, dagegen setzt die Prognose für Stickoxid und Russ mehrere Zonen voraus.

Als *quasidimensionale Modelle* werden jene Ansätze bezeichnet, welche ortsabhängige Variablen in Abhängigkeit von der Zeit in einer sonst nulldimensionalen Modellanwendung berücksichtigen. Die örtliche Auflösung von zumindest einer Dimension im System Brennraum ist bei Einspritzvorgängen und Schadstoffbildungsprozessen von Vorteil um die Qualität der nulldimensionalen Modellierung zu verbessern. Quasidimensionale Modelle erfordern einen höheren Anteil an Phänomenologie, stellen aber doch einen Kompromiss hinsichtlich Rechenzeit und Detaillierungsgrad dar. Eine genauere Beschreibung quasidimensionaler Modelle findet sich unter anderem bei *Pischinger* [20] und *Merker* [23].

Wird hingegen die Abhängigkeit von einer oder mehreren Ortskoordinaten explizit berücksichtigt, spricht man von *ein-* bzw. *mehrdimensionalen Modellen*. Das erforderliche Gleichungssystem beinhaltet neben der Kontinuitäts- und Energiegleichung auch die Lösung der Bewegungsgleichungen und eine Formulierung für die Beschreibung der turbulenten Strömung. Eindimensionale Modellansätze werden in erster Linie zur Simulation von Rohrströmungen eingesetzt. Mehrdimensionale Modelle werden in der Regel für detaillierte Berechnungen von Strömung, Gasdynamik, Verbrennung und Emissionsentstehung in modernen CFD-Codes herangezogen. Bezüglich einer genaueren Beschreibung der Grundlagen der CFD-Simulation, deren Lösungsalgorithmen und Diskretisierungsverfahren sei auf Fachliteratur verwiesen [24].

## 2.2.2 Brennratenmodelle

Die Grundlage für eine detaillierte Prognose von Gemischbildung und Verbrennung beim Dieselmotor bildet die durch Einspritzung und Brennraumgeometrie hervorgerufene Turbulenz im Brennraum. Je nach Simulationsmodell wird der Verbrennungsprozess und seine Einflussgrößen unterschiedlich beschrieben, die Bandbreite reicht von einfachen empirischen Ansätzen bis hin zu komplizierten reaktionskinetischen 3D-CFD Modellen. In diesem Kapitel werden die Stärken und Schwächen namhafter Brennratenmodelle diskutiert und Bedarf für Verbesserungen aufgezeigt.

- Nulldimensionale Modelle

Eine bereits seit vielen Jahren eingesetzte Methode zur Beschreibung der Brennrate für Otto- und Dieselmotoren stellt der auf empirischen Formulierungen basierende Ansatz von *Vibe* [26] dar. Die Berechnung der Brennrate erfolgt über die differentielle Formulierung der Umsatzrate mit Hilfe einer Exponentialfunktion. Für die Beschreibung des realen Verbrennungsverlaufs sind im Modell Annahmen für Brennbeginn, Verbrennungsdauer und einem Vibe-Formparameter notwendig. Da die Modellkonstanten grundsätzlich keine physikalischen Zusammenhänge zwischen Motorkonfiguration und Einspritzvorgängen abbilden, ist der Vibe-Ansatz nur für einfache Variationsrechnungen zu empfehlen.

Ein sehr häufig eingesetztes nulldimensionales Verbrennungsmodell stellt der nach *Chmela et al.* [29] entwickelte MCC-Ansatz dar, welcher über eine rein mischungs-kontrollierte Formulierung die Verbrennung anhand charakteristischer Parameter beschreibt. Dem Modell liegt die Annahme zu Grunde, dass bei Diffusionsflammen die chemischen Reaktionen nur von der Geschwindigkeit der Mischung von verfügbarer Kraftstoffmasse mit Luft und damit von der lokalen turbulenten kinetischen Energiedichte gesteuert wird. Die kinetische Energiedichte berechnet sich aus den Anteilen von Einlassströmung, Quetschströmung und der über die Einspritzstrahlen eingebrachten kinetischen Energie. Da aber dieselmotorische Verbrennungsvorgänge neben Mischungsauch reaktionskinetische Prozesse beinhalten, wurde in einer Erweiterung des Modells auch die vorgemischte Verbrennung auf Basis eines Arrhenius Ansatzes abgebildet [75]. Typische mit MCC ermittelte Brennraten und ein Vergleich mit der Analyse zeigt Abbildung 2-12 für einen Voll- und Teillastpunkt einer Lokomotive.

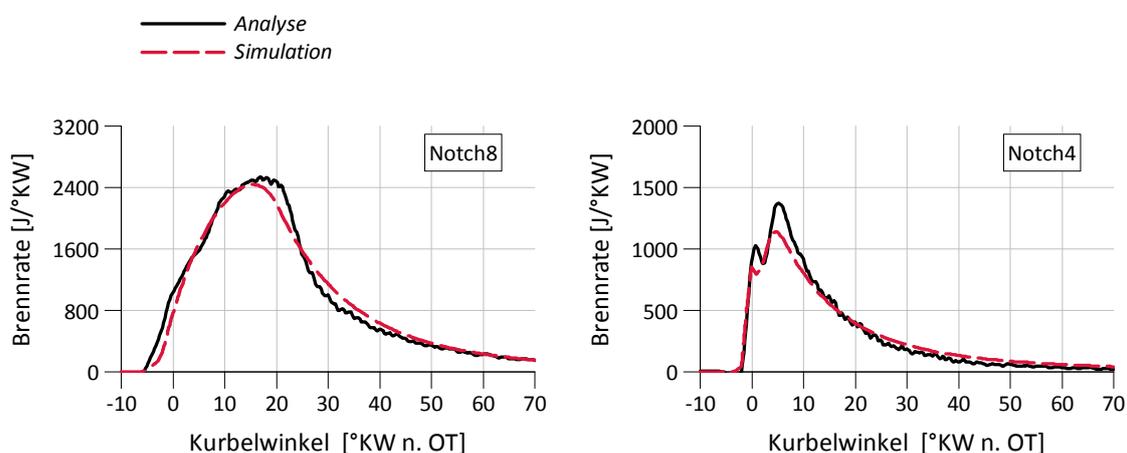


Abbildung 2-12: Simulation der Dieselverbrennung mit dem MCC-Modell

Um eine häufige Rekalibrierung der vier maßgeblichen Modellkonstanten zu vermeiden, wurde zur Abstimmung ein eigens dafür entwickeltes Optimierungswerkzeug eingesetzt [21]. Trotzdem stellen die wenigen Modellkonstanten einen oft limitierenden Faktor für die Modellabstimmung dar. Die dargestellten Ergebnisse demonstrieren, dass mit Unterschieden in der Abbildung von Zündverzug und vorgemischter Verbrennung zu rechnen ist - da das MCC-Modell die Verdampfungsgeschwindigkeit des Kraftstoffs nicht berücksichtigt. Auch die nulldimensionalen Zweizonen-Verbrennungsmodelle von *Merker* [27] oder *Heider* [28] stellen aufgrund der vereinfachten phänomenologischen Modellierung von physikalischen Prozessen keine wesentliche Verbesserung für die Simulation der Dieselverbrennung dar.

- Quasidimensionale Modelle

Eine zusätzliche Aufwertung in der Simulationsqualität erhofft man sich durch Übergang einer nulldimensionalen Formulierung auf eine quasidimensionale Betrachtung von Einspritzung und Verbrennung. *Hiroyasu* [32] entwickelte bereits in den 1980er Jahren ein quasidimensionales Mehrzonen-Verbrennungsmodell auf phänomenologischer Basis. Beim Modell von *Hiroyasu*, aber auch bei *Xiaoping* [31] erfolgt eine Diskretisierung des Einspritzstrahls in axialer und radialer Richtung in Pakete. Jedes einzelne Paket steht für sich im thermodynamischen Gleichgewicht und unterscheidet sich durch Temperatur und Gaszusammensetzung. Die Luftbeimischung von der Frischluftzone in die Strahlpakete erfolgt auf Basis der Impulserhaltung. Eine Schwäche beim Modell von *Hiroyasu* stellt jedoch die mangelnde Formulierung des Stoff- und Wärmetransports in den Reaktionszonen dar. Die Nichtberücksichtigung des Re-Entrainments führt zu einem abrupten Ende der Diffusionsverbrennung, da der Restsauerstoff den verbrannten Zonen nicht mehr zur Verfügung steht (vgl. Abbildung 2-13).

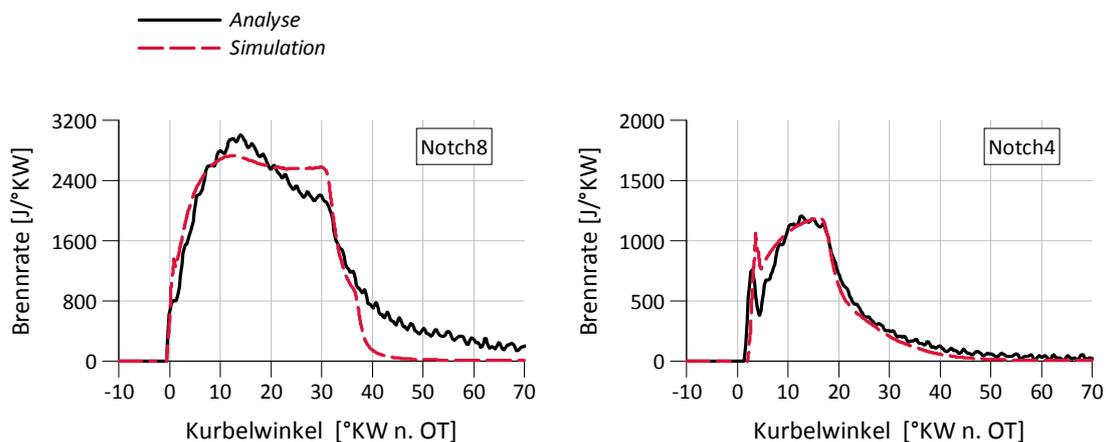


Abbildung 2-13: Simulation mit dem Modell von *Hiroyasu* ohne Re-Entrainment

Aufgrund dieser Tatsache berücksichtigt *Pötsch* [30][77] Restsauerstoff der verbrannten Ladung und mischt diesen im Laufe der Verbrennung erneut den einzelnen Verbrennungszonen bei. Eine Verbesserung des ursprünglichen Modells von *Hiroyasu* führte auch *Stiesch* [33] durch, indem er eine strömungsfeldabhängige Korrektur der Strahlpakete und eine maximale chemische Umsetzrate einführte. Aufgrund der exakteren phänomenologischen Beschreibung von physikalischen Effekten mit einer quasidimensionalen Modellierung kann gegenüber einer nulldimensionalen Formulierung mit Verbesserungen gerechnet werden.

- Dreidimensionale Modelle

Ein historisch häufig eingesetztes Verbrennungsmodell stellt das in CFD-Codes implementierte *Eddy-Breakup* oder *Magnussen-Modell* dar. Das Modell stützt sich auf die grundsätzlichen Erkenntnisse nach *Magnussen*, wonach chemische Reaktionen in vorgemischten turbulenten Flammen in kleinen Wirbeln ablaufen [34]. Durch den Zerfall der Wirbel und deren Umwandlung von kinetischer in thermische Energie erfolgt die Durchmischung auf molekularer Ebene. Die Beschreibung der unterschiedlichen Mischungs- und Reaktionsprozesse wird über die turbulente Damköhler-Zahl<sup>2</sup> ( $Da \gg 1$ ) charakterisiert, welche mathematisch die turbulente Flammenausbreitung beschreibt. Die Berechnung der Energiefreisetzung erfolgt anhand der Beschreibung der mikroskopischen Durchmischung mit Hilfe eines  $k-\epsilon$  Turbulenzmodells und der für die Verbrennung zur Verfügung stehenden Reaktionspartner. Durch eine modellrelevante Konstante ist eine Kalibrierung des Modells möglich, jedoch setzt die Abstimmung viel Erfahrung voraus und muss für jeden Betriebspunkt neu durchgeführt werden [37]. Ein Vergleich zwischen Analyse und Simulation mit dem Magnussen Modell für einen typischen Voll- und Teillastpunkt einer Lokomotive zeigt Abbildung 2-14.

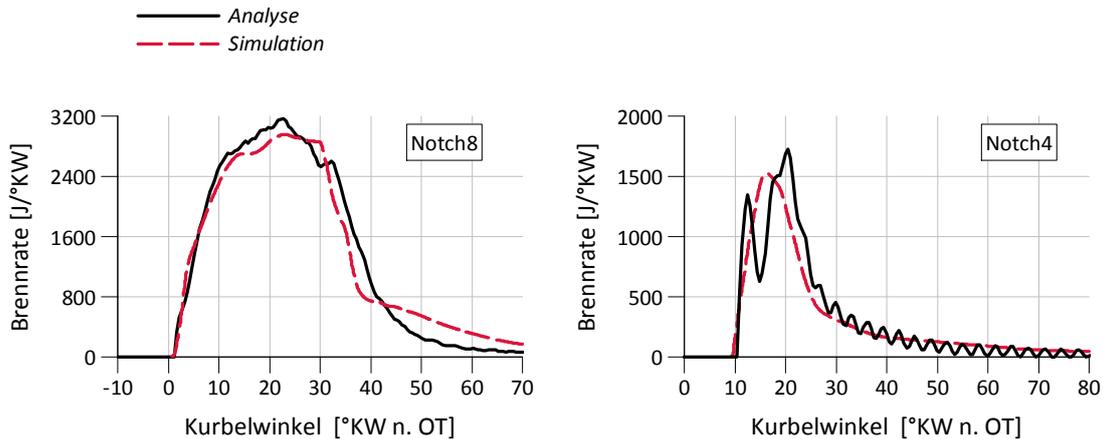


Abbildung 2-14: Simulation der Dieselerbrennung mit dem Magnussen-Modell [37]

Anhand der Ergebnisse aus Abbildung 2-14 geht hervor, dass sich auch für den Vollastpunkt wesentliche Unterschiede zwischen Analyse und Simulation einstellen. Dies liegt zum einen an der kurbelwinkelabhängigen Abstimmung der Modellkonstanten, zum anderen an der mangelnden physikalischen Beschreibung des dieselmotorischen Verbrennungsprozesses durch das Modell [23]. Noch dramatischer präsentiert sich die eingeschränkte Prognosefähigkeit anhand der Simulation des Teillastpunkts mit ausgeprägtem Vormischanteil. Es zeigt sich, dass die reaktionskinetisch dominierte vorgemischte Verbrennung durch die unzureichende Abbildung kleiner Damköhler-Zahlen ( $Da \ll 1$ ) nicht dargestellt werden kann. Deshalb ist der Einsatz des Magnussen-Modells zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung nicht zu empfehlen. Modelle auf Basis des Flamelet-Konzepts wie z.B. das ECFM-3Z Modell [43] zeigen eine wesentlich bessere Ergebnisqualität für die Simulation der dieselmotorischen Verbrennung [83]. Folglich ist sowohl für null- und quasidimensionale als auch für dreidimensionale CFD-Modelle weitere Entwicklungsarbeit notwendig bzw. eine andere Modellauswahl empfehlenswert.

<sup>2</sup> Die Damköhler-Zahl beschreibt das Verhältnis zwischen turbulenter Strömung  $\tau_1$  und chemischer Reaktion  $\tau_{ch}$

### 2.2.3 Stickoxidmodelle

Die thermische Stickoxidbildung im Dieselmotor hängt von der örtlichen Sauerstoffkonzentration und der Temperatur des verbrannten Arbeitsgases im „Post-flame-Bereich“ ab [35]. In der Literatur existiert eine Vielzahl von Modellen, welche nach unterschiedlichen Ansätzen Stickoxid berechnen. Die Ausgangsbasis bildet aber in den meisten Fällen der NO-Bildungsmechanismus nach Zeldovich [68]. Die thermische NO-Bildung ist dabei durch die Dissoziation des  $N_2$ -Moleküls und dessen Reaktion mit atomarem Sauerstoff getrieben.

In dieser Arbeit wird für die Berechnung der Temperatur der verbrannten Zone ein Zweizonen-Brennratenmodell nach den Annahmen von *Pischinger* [20] eingesetzt und die resultierende Stickoxid-Emission wird über den erweiterten Zeldovich-Mechanismus mit drei bzw. sechs Reaktionsgleichungen durch das Modell von *Pattas* [65] beschrieben (vgl. Kapitel 3). Andere Autoren, wie z.B. *Kyriakides et al.* [38] berechnen die Stickoxidbildung ebenfalls reaktionskinetisch, jedoch mit einem 2-Schritt Zeldovich Mechanismus. Der erforderliche atomare Sauerstoff wird aus der Dissoziation des  $O_2$ -Moleküls mit Hilfe des chemischen Gleichgewichts bestimmt. *Eyzat* [39] betrachtet hingegen ausschließlich eine globale Bildungsreaktion aus den Molekülen  $N_2$  und  $O_2$ , wobei diese Reaktion als nicht bedeutend für die NO-Bildung angesehen wird [41]. Auch *Heider* [28] und *Miller* [66] stützen sich in der NO-Berechnung auf ein Zweizonen-Verbrennungsmodell und eine reaktionskinetische Betrachtung nach Zeldovich. Unterschiede in der NO-Berechnung können durch die Anzahl der verwendeten Reaktionen und Spezies sowie aus der ermittelten Verbrennungstemperatur und Ladungszusammensetzung in der verbrannten Zone auftreten.

Die aktuelle Problematik der Simulation von Stickoxid stellt sich für den mittelschnelllaufenden Großdieselmotor augenscheinlich bei der Variation von Motorlast und Abgasrückführung dar. Abbildung 2-15 zeigt an dieser Stelle beispielhaft eine Lastvariation mit und ohne AGR für ausgewählte Betriebspunkte eines Lokomotivzyklus [7]. Den Simulationen liegt das in den Programmcode CATO [71] implementierte NO-Modell nach *Pattas* und *Häfner* mit sechs Reaktionsgleichungen zu Grunde.

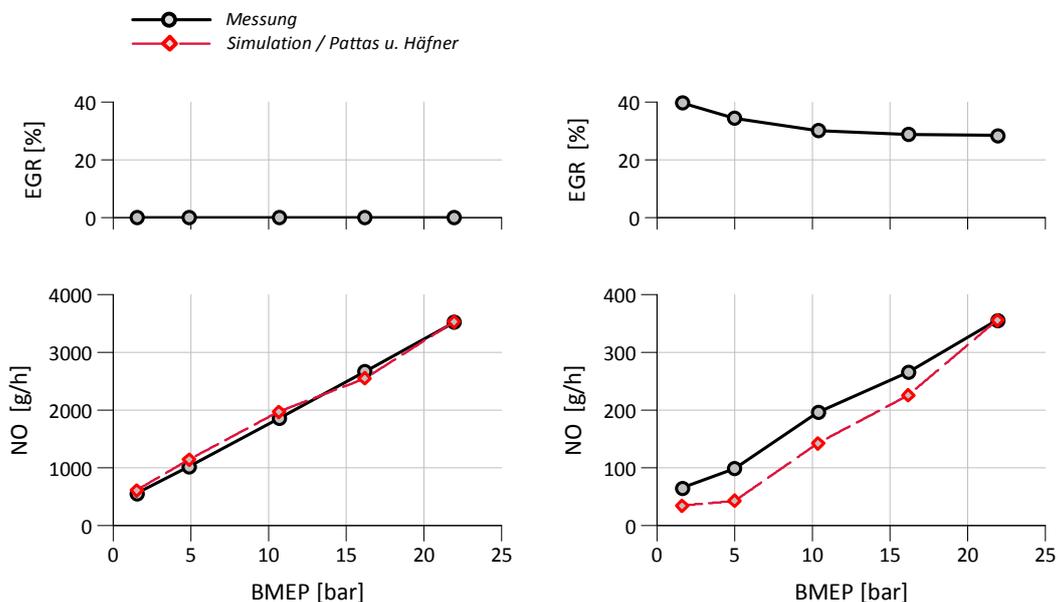


Abbildung 2-15: Berechnung von NO mit und ohne AGR über der Motorlast

Aus der linken Abbildung ist ersichtlich, dass es ohne Abgasrückführung über der Motorlast sehr wohl eine ausgezeichnete Prognosefähigkeit vorhanden ist. Die rechte Darstellung zeigt hingegen eine für Abgasrückführung deutlich zu geringe simulierte NO-Konzentration. Somit ist klar belegt, dass das Modell ein grundsätzliches Problem bei der Abbildung von AGR hat. Auch die Untersuchungen von *Kožuch* [40] am direkt-einspritzenden Nutzfahrzeugmotor untermauern die gleiche Problematik bei Variation der AGR-Rate über der Motorlast. *Kožuch* verwendete für seine Untersuchungen jedoch das Zweizonenmodell nach *Heider* [28] und berechnet Stickoxid auf Basis des erweiterten Zeldovich-Mechanismus. Trotz der Unterschiede in den Brennratenmodellen wird klar, dass historisch relevante Stickoxidmodelle Schwächen in der Darstellung von AGR zeigen. Da aber für zukünftige Gesetzgebungen AGR als eine mögliche Emissionserfüllungsstrategie gesehen wird [44], ist eine Verbesserung von thermischen Stickoxidmodellen eine notwendige Voraussetzung.

Eine Erweiterung des Zeldovich-Modells mit einem wesentlich komplexeren Reaktionsmechanismus stellt eine Optimierungsmöglichkeit dar, führt aber laut *Stiesch* [33] zu keiner nennenswerten Verbesserungen in der Ergebnisqualität. Auch der Einsatz von empirischen Modellen wie z.B. jenes von *Hohenberg et al.* [41] stellt keine mögliche Alternative dar, da die Abstimmung derartiger Modelle an eine umfangreiche Versuchsdatenbasis eines Motors gebunden ist.

Zur effizienten Vorausberechnung von Stickoxid wird deshalb eine umfangreiche Verbesserung des Modells von *Pattas* empfohlen. Aufgrund dessen beschreibt Kapitel 4 wichtige Einflussgrößen und daraus abgeleitete Maßnahmen zur verbesserten Vorausberechnung von Stickoxid.

### 3 Eingesetzte Simulationsmodelle

#### 3.1 Brennratenmodelle

##### 3.1.1 Zweizonen-Rechenmodell LEC-DCM (Diesel Combustion Model)

Das vorher genannte MCC-Modell arbeitet mit zeitlich integralen Werten für die momentan für die Verbrennung zur Verfügung stehende Kraftstoffmasse und der momentanen Turbulenzdichte. Um einen noch engeren Zusammenhang zwischen Einspritzrate und Brennrate herzustellen, wurde in einer Weiterentwicklung des Modells (LEC-DCM) ein auf der Theorie des freien Gasstrahls basierendes vereinfachtes Strahlmodell [82] für den Dieselstrahl implementiert, siehe [49].

Das DCM-Modell verwendet eine konsistente Methodik basierend auf den Ansätzen von Arrhenius und Magnussen für die Beschreibung der Reaktionsrate, was eine Darstellung von Zündverzug, vorgemischter Verbrennung und Diffusionsverbrennung als separate Phasen möglich macht. Der Diffusionsverbrennung wird ein zweistufiger Ansatz zu Grunde gelegt, mit dem einerseits mittels eines integralen Einspritzstrahlmodells die Verteilung der Konzentrationen von Kraftstoff und Sauerstoff während der Einspritzung ermittelt, andererseits das anschließende Ausbrennen mit dem klassischen MCC-Ansatz beschreibt. Der komplette Brennverlauf setzt sich schließlich durch die Addition der Einzelprozesse zusammen und lässt sich nach Gleichung (3-1) beschreiben.

$$\frac{dQ_{tot}}{dt} = \frac{dQ_{pre}}{dt} + \frac{dQ_{spray}}{dt} + \frac{dQ_{out}}{dt} \quad (3-1)$$

Durch die Verwendung des Strahlmodells wird eine grundlegende Verbesserung in der Beschreibung der Effekte von transienten Einspritzverläufen auf die Diffusionsverbrennung erzielt, da die augenblicklich für die Verbrennung verfügbare Kraftstoffmasse und die lokale Turbulenzdichte bekannt ist. Der Einspritzstrahl wird vom Modell durch Vorgabe von Strahlkegelwinkel  $\Theta$  und berechneter Penetrationslänge  $s$  auf Basis der Erhaltungsgleichungen für Impuls und Masse über die Integration des Einspritzkegelvolumens beschrieben, vgl. Abbildung 3-1.

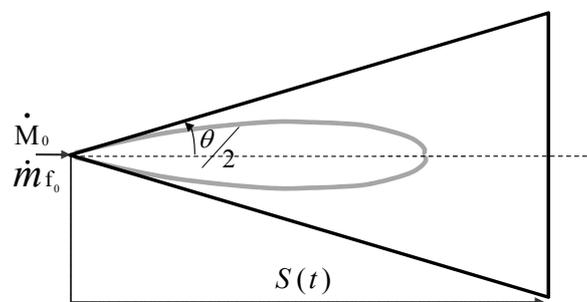


Abbildung 3-1: Beschreibung des Einspritzstrahls über Kegelwinkel und Penetrationslänge

Mit Hilfe der mathematischen Formulierung des Spraykegels lässt sich auf Grundlage der Erhaltung von Masse und Impuls ein Zusammenhang zwischen eingespritzter Kraftstoffmasse zur totalen Spraykegelmasse herstellen, siehe [81].

Unter Annahme eines konischen Einspritzstrahls mit dem Kegelwinkel  $\Theta$  ergibt sich eine Formulierung für den lokalen Mischungsbruch im Einspritzstrahl nach Gleichung (3-2).

$$f_{Jet} = \frac{m_{fuel}}{m_{Spray}} = \frac{m_{fuel}}{\rho \tan^2\left(\frac{\Theta}{2}\right) \frac{\pi}{3} s^3} \quad (3-2)$$

Mithilfe des Mischungsbruchs findet sich eine Formulierung für den zeitlich veränderlichen Kraftstoffmassenbruch  $Y_{Mix} = f(f_{Jet})$  im Einspritzstrahl.

Der Kraftstoffmassenbruch definiert sich durch den Quotienten aus der verfügbaren Kraftstoffmasse  $m_{f,mix}$  zur gesamten Kraftstoffmasse  $m_{fuel}$  für ein definiertes Luftverhältnis im Einspritzstrahl. Die Steuerung der für den Massenbruch notwendigen Lambda-Grenze setzt allerdings im Modell eine zusätzliche Konstante voraus. Mit Kenntnis der während der Einspritzung aufbereiteten und für die Verbrennung augenblicklich zur Verfügung stehenden Kraftstoffmasse ist eine verbesserte Abbildung der mischungskontrollierten Diffusionsverbrennung machbar.

Berücksichtigt man zudem noch zusätzliche die Ausbrennphase so ergibt sich nach Gleichung (3-3) die exakte Formulierung für die gesamte Diffusionsverbrennung. Die Beschreibung der vorgemischten Verbrennung ist unter [81] nachzulesen.

$$\frac{dQ_{diff}}{dt} = C_{Mod} \left( Y_{Mix} \cdot m_{fuel} - \frac{Q_{diff}}{H_U} \right) H_u + C_{out} m_{out,avail} \frac{\sqrt{k}}{\sqrt[3]{V_{Cyl}}} H_u \quad (3-3)$$

Bisherige vielversprechende Ergebnisse von *Pirker* [76] und umfangreiche Untersuchungen des Autors [83] offenbaren ein sehr hohes Potential des DCM-Modells für die Simulation des dieselmotorischen Verbrennungsprozesses. Die Methodik des DCM Modells erlaubt aufgrund seiner direkten Koppelung an den Einspritzverlauf eine sehr genaue Beschreibungen der Verbrennung für Vor-, Haupt- und auch Nacheinspritzung [83]. Eine exakte Einspritzrate ist allerdings die Grundvoraussetzung für eine hohe Ergebnisqualität der Simulation mit DCM (vgl. Kapitel 5).

Die Kalibrierung des Modells erfolgt über vier relevante Modellparameter, welche am besten mit Hilfe eines Optimierungsalgorithmus ermittelt werden [21]. Der erforderliche Aufwand der Modellabstimmung und die daraus resultierende Prognosefähigkeit der Verbrennung ist auch nicht maßgeblich an eine breite Versuchsdatenbasis gebunden [4].

## 3.1.2 Mehrzonen-Paketmodell MZCM (Multi Zone Combustion Model)

Beim MZCM Modell nach *Pötsch* [77] handelt es sich um einen quasidimensionalen Multizonen-Paketansatz auf Basis des Strahlmodells von *Hiroyasu* [32]. Allerdings berücksichtigt MZCM auch Stoff- und Wärmeaustauschprozesse in den Reaktionszonen. Die Grundlage des Modells stellt die Diskretisierung des Einspritzstrahls in axialer und radialer Richtung in eine Vielzahl eigenständiger Reaktionszonen dar. In diesen Zonen erfolgt zu jedem Zeitpunkt die Berechnung von Temperatur und Ladungszusammensetzung. Abbildung 3-2 zeigt beispielhaft die zeitliche Unterteilung des Einspritzstrahls in eine große Anzahl von Paketen, die in ihrer Summe die Kontur des Einspritzstrahls abbilden.

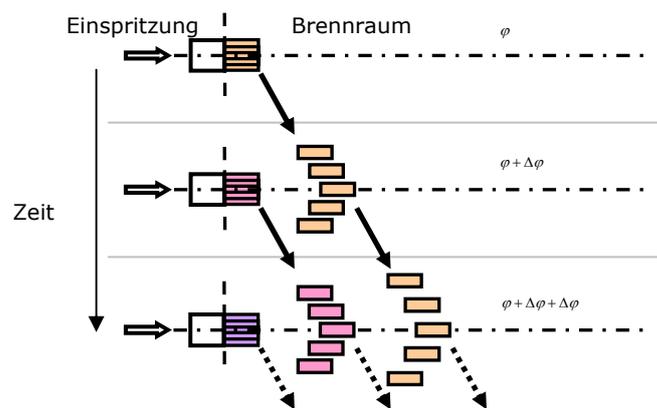


Abbildung 3-2: Beschreibung des Einspritzstrahls mit dem Multi-Zonen Paket Modell [77]

Die Generierung der Reaktionszonen erfolgt zunächst durch reine Kraftstoffpakete, die sich unmittelbar nach dem Eintritt in den Brennraum mit der Zylinderladung zu vermischen beginnen. Gleichzeitig beginnt der Strahlerfall und die Verdampfung des eingespritzten flüssigen Kraftstoffs. Dieser wird von der umgebenden heißen Ladung aufgeheizt und verdampft in weiterer Folge. Im Gegensatz zum DCM-Modell erfolgt bei MZCM eine Berücksichtigung von Tropfenaufbruch und Tropfengröße anhand des Modells von *Varde* [78], die Verdampfung wird mit dem Modell von *Borman* [79] beschrieben. Sobald eine Zone ein brennbares Gemisch aufweist, setzt nach der Zündverzugszeit die Verbrennung ein.

Ein Unterscheidungsmerkmal zum ursprünglichen Modell von *Hiroyasu*, welcher keinerlei Wärme- oder Massentransport zwischen den einzelnen Zonen berücksichtigt, stellt die Beschreibung des sogenannten „Re-Entrainments“ dar. Dabei werden Teile der verbrannten Zone im Laufe der Verbrennung erneut den einzelnen Verbrennungszonen beigemischt, sodass Restsauerstoff aus der verbrannten Zone genutzt werden kann. Dies hat zur Folge, dass Sauerstoff in den Spray-Zonen noch gegen Ende der Verbrennung zur Verfügung steht bzw. Ladungsmasse noch vor Ende der Verbrennung vorhanden ist.

Die Beschreibung der zeitlich umgesetzten Kraftstoffmasse erfolgt auf Basis eines Arrhenius-Ansatzes nach Gleichung (3-4). Im Modell wird die Wärmefreisetzung durch die Massenanteile für Ladungs-Entrainment  $x_{O_2}$ , Verdampfung  $x_{fuel}$  und durch einen Reaktionskinetikparameter  $K_b$  als Funktion von Druck und Temperatur kontrolliert. Die Zahlenwerte der Arrhenius-Konstanten entsprechen den Empfehlungen von *Pötsch*, *Stiesch* [80] schlägt hingegen andere Zahlenwerte vor.

Die Steuerung der wesentlichen Mechanismen - Verdampfung, Entrainment und chemischer Reaktionskinetik - erfolgt über modellspezifische Konstanten, deren Kalibrierung händisch anhand von Messungen durchgeführt werden muss.

$$\frac{dm_{fuel}}{dt} = K_b \cdot \rho_f^{a_{rho}} \cdot p^{b_p} \cdot x_{fuel} \cdot x_{O_2}^{c_{O_2}} \cdot e^{\left(\frac{-E_a}{R_m T}\right)} = K_b \cdot \rho_f \cdot x_{fuel} \cdot x_{O_2}^{1.5} \cdot e^{\frac{-1200}{T}} \quad (3-4)$$

Die Formulierung der reaktionskinetisch kontrollierten Wärmefreisetzung basiert auf dem Einschritt-Mechanismus von *Stiesch* [80]. Die gesamte Wärmefreisetzung aller Zonen erfolgt auf Basis von Gleichung (3-5).

$$\frac{dQ_{tot}}{dt} = \sum_{i=1}^n \frac{dm_{fuel}}{dt} \cdot H_u \quad (3-5)$$

Mithilfe der Formulierungen für Tropfenaufbruch und Verdampfung ist eine Beschreibung des Sprays und in weiterer Folge der dieselmotorischen Verbrennung auf quasidimensionaler Ebene möglich. Der Vorteil des Modells gegenüber einem turbulenzkontrollierten Modell beruht auf der Abbildung wesentlicher Mechanismen im Einspritzstrahl unter Berücksichtigung von Tropfenaufbruch und Verdampfung. Auch das Miteinwirken des Re-Entrainments verbrannter Ladung und des Wärmeübergangs in den Strahlpaketen grenzen das Modell zu anderen aus der Literatur bekannten Modellen ab. Aufgrund dessen erreicht das Modell ein hohes Maß an allgemeiner Gültigkeit.

Die Vorteile der komplexeren Beschreibung führen allerdings naturgemäß dazu, dass eine größere Anzahl von Modellkonstanten anzupassen ist.

Die bei Zwei-Zonenmodellen notwendige Annahme eines lokalen Lambdaverlaufs [71] für die verbrannte Zone entfällt beim MZCM-Modell, da ein massengemittelter Lambdaverlauf aller Sprayzonen berechnet wird. Mit Hilfe der quasidimensionalen Modellierung ist daher eine Aussage über den Zustand und die Zusammensetzung im Einspritzstrahl möglich. Durch Kenntnis der lokalen Lambda-Temperaturverteilung im Strahl sind Vorteile hinsichtlich der Berechnung von Stickoxid aber auch von Russ zu erwarten. Auch bei MZCM stellt ein exakter Einspritzratenverlauf die Voraussetzung für eine hohe Prognosefähigkeit dar.

Simulationsstudien des Autors [83] demonstrierten auch für das MZCM-Modell eine hohe Abbildungsgenauigkeit des dieselmotorischen Verbrennungsprozesses. Aufgrund dieser Tatsache wurde das MZCM-Modell für die im Kapitel 6 gezeigten Variationsrechnungen herangezogen.

### 3.1.3 ECFM-3Z Modell (3-Zones Extended Coherent Flame Model)

Das ECFM-3Z Modell gehört zur Gruppe der Flammenflächenmodelle d.h. der chemische Verbrennungsprozess wird durch makroskopische Mischungsvorgänge der Reaktionspartner gesteuert. Es wird angenommen, dass die Turbulenz des Luft-Kraftstoffgemisches eine makroskopische Bewegung während der Verbrennung verursacht, die zu einer Ausdehnung der Flammenfront führt. Flammenflächenmodelle ermöglichen über eine parametrisierte Beschreibung der Flammenflächendichte (Flame-Surface Density) die drei wesentlichen Regime der Dieselerbrennung - nämlich Selbstzündung, vorgemischte Verbrennung und Diffusionsflamme - zu beschreiben.

Das Modell unterteilt die einzelnen Zellen des Berechnungsnetzes in Zonen mit Luft und Kraftstoff. Nach Ende der Einspritzung des Kraftstoffs liegt in den Zellen jeweils Luft und verdampfter ungemischter Kraftstoff vor (vgl. Abbildung 3-3).

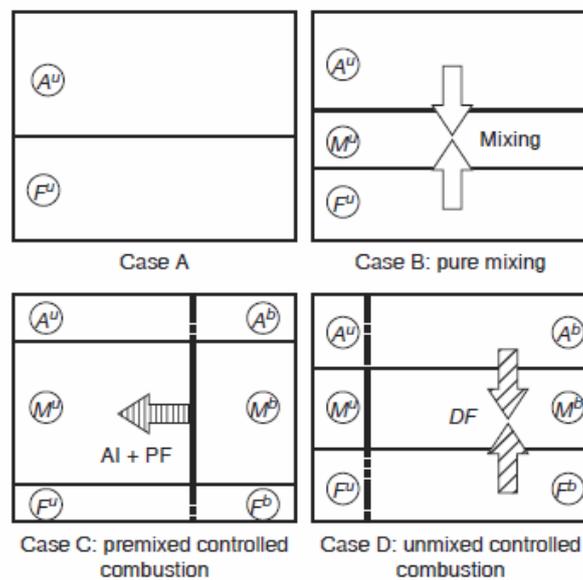


Abbildung 3-3: Funktionsweise des ECFM-3Z Modells [42]

Über ein integriertes Mischungsmodell wird Luft und Kraftstoff in die Mischungszone transportiert. Die Definition der Mischung erfolgt über eine Speziestransportgleichung nach Gleichung (3-6).

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_x}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_x}{\partial x_i} \right) + \bar{\omega}_x \quad (3-6)$$

In der Gleichung repräsentieren  $\mu$  und  $\mu_t$  die laminare und turbulente Wirbelviskosität,  $Sc$  und  $Sc_t$  die laminare und turbulente Schmidt-Zahl. Der Quellterm  $\bar{\omega}_x$  berücksichtigt die Mischung und  $\tilde{Y}_x$  charakterisiert den mittleren Massenbruch der Spezieskonzentration  $x$ .

Der mittlere Massenbruch  $\bar{Y}_x$  stellt dabei ein Verhältnis von Speziesmasse zur Gesamtmasse in der Rechenzelle dar und hängt damit maßgeblich von der mittleren Dichte  $\bar{Y}_x = f(\bar{\rho})$  ab.

Nach erfolgter Mischung von Luft und Kraftstoff wird über ein integriertes Zündmodell in Abhängigkeit von Druck, Temperatur und Restgasgehalt die Zündverzugszeit berechnet und das Luft/Kraftstoffgemisch entzündet. Die der lokalen Selbstzündung nachfolgende vorgemischte Verbrennung wird im ECFM-3Z Modell als homogener Reaktionsprozess abgebildet. Für die Diffusionsverbrennung (Fall D) geht man davon aus, dass die chemischen Reaktionen deutlich schneller ablaufen als die Diffusion von Kraftstoff und Sauerstoff in die Reaktionszone. Die Reaktion wird also von der lokalen Mischungsrate von Kraftstoff mit Verbrennungsluft bestimmt. Die Steuerung des Transports von Kraftstoff und Sauerstoff in die Mischungszone und in weiterer Folge in die verbrannte Zone erfolgt unter Annahme eines lokalen stöchiometrischen Luftverhältnisses.

Auf molekularer Ebene steuern Massen- und Wärmeübergangsprozesse die Verbrennungsreaktionen d.h. die Verbrennungskinetik wird hauptsächlich durch Diffusionsvorgänge im mikroskopischen Bereich bestimmt. Die Mischung von Luft und Kraftstoff wird durch den Quellterm  $\varpi_x$  in der Speziestransportgleichung berücksichtigt.

Der Mischungszeitmaßstab ist dabei proportional zum Zeitmaßstab der Turbulenzmodellierung und lässt sich nach Gleichung (3-7) ausdrücken.

$$\frac{1}{\tau_m} = \beta_m \frac{\varepsilon}{k} \quad (3-7)$$

Die Formulierung des Mischungszeitmaßstabs nach Gleichung (3-7) lässt erkennen, dass das Verhältnis von turbulenter kinetischer Energiedichte  $k$ , Dissipationsrate  $\varepsilon$  und einer Konstante  $\beta_m$  die turbulente Mischung bestimmt.

Die klare Trennung von Zündung, reaktionskinetischem Vormischprozess und Diffusionsverbrennung in der Modellierung erlaubt eine Beschreibung für konventionelle und auch alternative Brennverfahren. Die Beschreibung der Kraftstoffoxidation in der Reaktionszone erfolgt mittels eines mehrstufigen Reaktionsprozesses. In einem ersten Schritt wird Kraftstoff über einen dreistufigen Reaktionsansatz zunächst teilweise oxidiert und in  $\text{CO}_2$  und  $\text{CO}$  umgewandelt. Danach erfolgt die weitere Oxidation von  $\text{CO}$  durch Reaktion mit  $\text{OH}$ , erläutert durch eine separate Reaktionsgleichung (vgl. Gleichung (3-8)).



Schließlich kommt ein Gleichgewichtsansatz zur Anwendung, welcher die endgültigen Spezieskonzentrationen einschließlich Radikalkonzentrationen für die nachfolgende Schadstoffberechnung bestimmt. Die Modellabstimmung wird anhand dreier relevanter Parameter durchgeführt, welche Mischungsrate, chemische Reaktionszeit und Zündverzug steuern. Detailliertere Informationen sind bei *Colin* und *Benkenida* [42] nachzulesen.

Ein praxisorientierter Einsatz des Modells setzt jedoch Einarbeitungszeit und Erfahrung des Anwenders in der Berechnung der Verbrennung mit CFD voraus. Die Funktionsweise des Modells ermöglicht jedoch eine zielsichere Vorausrechnung der dieselmotorischen Verbrennung mit der 3D-CFD Simulation [83].

## 3.2 Schadstoffbildungsmodelle

Stickoxide stellen als Reizgase und als Vorläufersubstanzen für die bodennahe Ozonbildung ein Problem für Mensch und Umwelt dar. In der motorischen Verbrennung bildet sich fast ausschließlich das Atem- und Reizgas Stickstoffmonoxid NO, welches in der Atmosphäre weiter zu Stickstoffdioxid NO<sub>2</sub> oxidiert [67]. Die Summe aus NO und NO<sub>2</sub> wird als NO<sub>x</sub> bezeichnet. Besonders im Bereich der Dieselvebrennung spielt die Emission von Russ bzw. Partikeln eine große Rolle. Die kanzerogene Wirkung von Russ, hervorgerufen durch die Eindringung kleinster Russpartikel in die Aveolen der Lunge kann zu Erkrankungen beim Menschen führen [67]. Die eingesetzten Modelle zur Berechnung von Stickoxid und Russ werden in diesem Kapitel erklärt.

### 3.2.1 Stickoxidbildungsmechanismen

Stickoxide können nach unterschiedlichen Mechanismen gebildet werden. Man unterscheidet den thermischen-, prompten- und Kraftstoff-NO Bildungspfad.

- Kraftstoff NO

Der in fossilen Kraftstoffen organisch gebundene Stickstoff kann bei Verbrennungsprozessen zur Bildung von Stickoxid führen. Abhängig von den lokalen Temperaturen wird die Bildung von NO über Radikalkonzentrationen wie HCN, NH<sub>3</sub>, N, CN oder NH eingeleitet. Da der Masseanteil an Stickstoff bei handelsüblichen Kraftstoffen (Ausnahme Schweröle und Kohle) meist unter 0,1% liegt, spielt diese Form der NO-Bildung nur eine untergeordnete Rolle [23].

- Promptes NO

Der Mechanismus der prompten NO-Bildung wurde von Fenimore bereits im Jahre 1979 entdeckt. Die Entstehung von NO wird dabei über die Reaktion des CH-Radikals in der Flammenfront mit HCN (Blausäure) als Zwischenprodukt eingeleitet. Aufgrund der niedrigen Aktivierungsenergie kann die Reaktion schon bei niedrigen Temperaturen in Gang gesetzt werden. Der Reaktionsmechanismus lässt sich nach *Merker* [23] wie folgt schreiben:



Aufgrund der für die Reaktion zur Verfügung stehenden geringen Verweilzeit in der Dieselflamme ist der Reaktionsmechanismus vernachlässigbar [35].

- Thermisches NO

Als dominierender Faktor der Stickoxidbildung im Verbrennungsmotor ist der thermische NO-Bildungspfad zu sehen. Im Brennraum erreicht die NO-Bildung nicht das thermische Gleichgewicht, daher darf deren Berechnung nicht nach dem chemischen Gleichgewicht sondern nach der Kinetik erfolgen. Im Zuge der Berechnung der NO-Konzentration muss deshalb die Bildung und der Zerfall von Stickoxid berücksichtigt werden.

Die Stickoxidbildung hängt vom Temperaturgradienten der verbrannten Gase, der molaren Konzentrationen der beteiligten Moleküle und der Reaktionszeit ab. Die Globalreaktion für die NO-Bildung aus der Gleichgewichtschemie lautet:

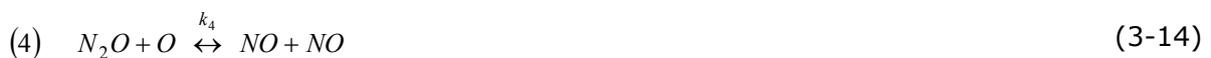


Diese exklusive Einzelreaktion findet heute allerdings keine Bedeutung mehr. Als primärer Prozess für die Bildung von thermischen Stickoxid gilt der nach *Y.A. Zeldovich* [68] 1946 postulierte Mechanismus, welcher über folgende Elementarreaktionen beschrieben wird:



Die Endprodukte dieser Reaktionen werden auch als thermisches NO bezeichnet, da die erste Reaktion aufgrund der starken N<sub>2</sub>-Dreifachbindung eine hohe Aktivierungsenergie benötigt und erst bei hohen Temperaturen ausreichend schnell abläuft. Die erste Reaktion stellt folglich den geschwindigkeitsbestimmenden Schritt des Zeldovich-Mechanismus dar. Der nach Ablauf von Reaktion 1 gebildete atomare Stickstoff bildet die Basis für die weitere NO-Bildung nach den Reaktionen 2 und 3.

Um die bei niedrigen Temperaturen und hohem Luftverhältnis entstehende NO-Bildung über Distickstoffmonoxid N<sub>2</sub>O miteinfließen zu lassen [70], empfiehlt sich eine Erweiterung des Reaktionsschemas. *Pattas* [65] ergänzte 1973 den reaktionskinetischen Mechanismus um die Reaktionen 4-6, wobei Reaktion 4 der Arbeit von *Lavoie* [69] entnommen wurde:



Die niedrige Aktivierungsenergie von Reaktion 4 führt nach der Bildung von N<sub>2</sub>O als Zwischenprodukt zur schlagartigen Bildung von NO. Die Berechnung der temperaturabhängigen Geschwindigkeitskonstanten erfolgt auf Basis des eingesetzten Verbrennungsmodells über die Temperatur in der verbrannten Zone.

### 3.2.2 Reaktionskinetisches NO-Modell nach Pattas und Häfner

In der Literatur findet sich eine Vielzahl von Modellen, welche für die Berechnung von Stickoxid in Frage kommen. In dieser Arbeit wurde auf das bekannte reaktionskinetische Modell von *Pattas* und *Häfner* [65] zurückgegriffen, da es sowohl im hauseigenen Motorprozessrechenprogramm CATO [71] als auch in den NO-Modellen der 0D-1D und der 3D-CFD Simulation implementiert ist. Das Modell berechnet die thermische NO-Bildung nach dem erweiterten Zeldovich-Mechanismus. Die für das Modell relevanten Reaktionsgleichungen wurden bereits in Kapitel 3.2.1 beschrieben.

Die reaktionskinetische NO-Modellierung verlangt eine Modellierung für Hin- und Rückreaktion der Geschwindigkeitskonstanten. Auf Basis des Ansatzes von Arrhenius setzt sich deren Berechnung aus Aktivierungsenergie  $E_a$ , Stoßzahl  $A$ , Temperaturbeiwert  $B$  und den jeweiligen Konzentrationen der jeweiligen Spezies nach Gleichung (3-17) wie folgt zusammen:

$$k = A \cdot T^B \cdot e^{\left(\frac{-E_a}{R_m \cdot T}\right)} \quad (3-17)$$

Die Zahlenwerte der Konstanten  $A$ ,  $B$  und  $E$  in der Arrheniusgleichung werden durch Experimente bestimmt. Allerdings finden sich in der Literatur unterschiedliche Angaben über deren Größe. In dieser Arbeit wurde vorerst auf von *Pattas* publizierten Konstanten zurückgegriffen. Im weiteren Verlauf der Untersuchungen wurden auch neuere Zahlenwerte gefunden und im Modell ausprobiert (vgl. Kapitel 4.1.4). Die Formulierung der ersten zwei Reaktionsgleichungen für die NO-Hinreaktion beschreibt Gleichung (3-18) und Gleichung(3-19).

$$k_{1v} = 4.93 \cdot 10^{13} \cdot T^{0.047} \cdot e^{\left(\frac{-38065}{T}\right)} \quad (3-18)$$

$$k_{2v} = 1.48 \cdot 10^8 \cdot T^{1.500} \cdot e^{\left(\frac{-2860}{T}\right)} \quad (3-19)$$

Unter Zugrundelegung des chemischen Gleichgewichts der Konzentration für molekularen und atomaren Sauerstoff  $[O_2]_G$  und  $[O]_G$  sowie Stickstoff  $[N_2]_G$  ergibt sich die Formulierung der Differentialgleichung der NO-Konzentration für die Hin- und Rückreaktion am Beispiel der ersten zwei Reaktionsgleichungen:

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_{1v} \cdot [N_2]_G \cdot [O]_G - k_{1r} \cdot [NO] \cdot [N] + k_{2v} \cdot [O_2]_G \cdot [N] - k_{2r} \cdot [NO] \cdot [O]_G \dots \quad (3-20)$$

Die zeitliche Änderung des atomaren Stickstoffs wird als quasistationär betrachtet. Die Differentialgleichung kann auf Basis der ersten zwei Reaktionsgleichungen wie folgt formuliert werden:

$$\frac{d[N]}{dt} = k_{1v} \cdot [N_2]_G \cdot [O]_G - k_{1r} \cdot [NO] \cdot [N] - k_{2v} \cdot [O_2]_G \cdot [N] + k_{2r} \cdot [NO] \cdot [O]_G = 0 \quad (3-21)$$

Durch Annäherung der NO-Konzentration an das chemische Gleichgewicht mittels einer Gleichgewichtsrelation  $\alpha$  nach Gleichung (3-22)

$$\alpha = \frac{NO}{NO_G} \quad (3-22)$$

und der Formulierung für die Faktoren K, welche sich aus den Reaktionsraten für chemisches Gleichgewicht der entsprechenden Reaktionsgleichung zusammensetzen, folgt Gleichung (3-23).

$$K_2 = \frac{R_{1,G}}{R_{2,G} + R_{3,G}}; \quad K_4 = \frac{R_{4,G}}{R_{5,G} + R_{6,G}} \quad (3-23)$$

Nach Berechnung der atomaren Stickstoffkonzentration [N] aus Gleichung (3-21) und mit Gleichung (3-22) sowie der entsprechenden Reaktionsraten für chemisches Gleichgewicht für Vor- und Rückreaktion erhält man nach einigen Umformen unter Zuhilfenahme von Gleichung (3-23) die Differentialgleichung für die zeitliche NO-Konzentration unter Berücksichtigung der Reaktionen des erweiterten Zeldovich Mechanismus.

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2 \cdot (1 - \alpha^2) \cdot \left( \frac{R_{1,G}}{1 + \alpha \cdot K_2} \right) \quad (3-24)$$

Der Lösungsweg für die Herleitung der Differentialgleichung für 6 Reaktionen ähnelt dem Weg mit 3 Reaktionen, erfordert jedoch eine Berücksichtigung der Reaktionsraten 4 bis 6 und eine dementsprechende Umformung des Gleichungssystems. In Gleichung (3-25) findet sich die fertige Formulierung der Differentialgleichung der NO-Konzentration unter Berücksichtigung der Reaktionen 1 bis 6. Die vollständige Herleitung von Gleichung (3-25) ist unter [65] nachzulesen.

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2 \cdot (1 - \alpha^2) \cdot \left( \frac{R_{1,G}}{1 + \alpha \cdot K_2} + \frac{R_{4,G}}{1 + K_4} \right) \quad (3-25)$$

Als Unbekannte zur Lösung der Differentialgleichung bleibt lediglich die Temperatur und die Gleichgewichtskonzentration der betrachteten Spezies. Da die Stickoxidbildung im Post-Flame Bereich der Flamme auftritt, kann für die Berechnung der Stickoxidkonzentration die Temperatur der verbrannten Zone herangezogen werden. Dies ist mit Zwei- oder Mehrzonenmodellen möglich. Die Berechnung der Spezies erfolgt im Fall des Prozessrechenprogramms CATO unter Berücksichtigung der O<sub>2</sub>-Dissoziation über eine am Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik entwickelte Routine [72]. Der CFD-Code FIRE<sup>®</sup> berechnet thermisches Stickoxid ebenso auf Basis von Gleichung (3-24). Die relevante Verbrennungstemperatur wird auf Basis des ECFM-3Z Modells berechnet. Als Grundlage für die Berechnung der Spezieskonzentration verwendet ECFM-3Z den *Meintjes/Morgan Mechanismus* [73].

## 3.2.3 Lund Flamelet Russmodell

In dieser Arbeit wird gemäß den Empfehlungen von *Schaffer* [37] das *Lund-Modell* [89] zur Berechnung von Russbildung und Russoxidation eingesetzt. Dieses Modell basiert auf einem komplexen reaktionskinetischen Mechanismus zur Beschreibung der Russbildungs- und Oxidationsreaktionen. Die effiziente Implementierung des Russmodells in die 3D-CFD Simulation gelingt über die Lösung von zwei zusätzlichen Transportgleichungen für den Mittelwert des Mischungsbruchs (vgl. Gleichung (3-26)) und dessen Varianz.

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_j\tilde{Z})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu_e}{S_{Cl,Z}} \cdot \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right) \quad (3-26)$$

Der Mischungsbruch  $\tilde{Z}$  definiert sich aus dem Quotienten von verbrannter und unverbrannter Kraftstoffmasse zur Gesamtmasse. Die lokale mittlere Russbildungsrate wird durch Integration der momentanen Bildungsraten durch Annahme einer Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Mischungsbruch ermittelt. Die Berechnung der Russkonzentration geschieht über eine Formulierung der Quellterm Betrachtung für Keimbildung, Oberflächenwachstum, Koagulation/Agglomeration und Oxidation auf Basis von Mischungsbruch, Dissipationsrate, Druck und Temperatur (vgl. Abbildung 3-4). Die Steuerung Anteile des Quellterms wird über vier Parameter im Modell vorgegeben.

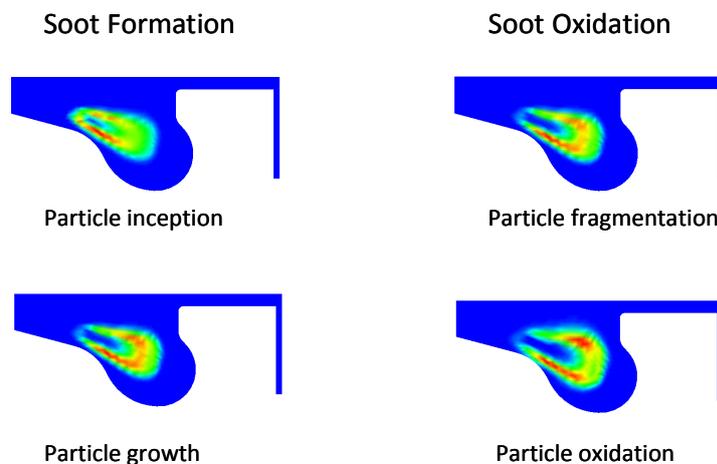


Abbildung 3-4: Darstellung der unterschiedlichen Teilprozesse für die Formation und Oxidation von Russ im Lund-Modell

Die Russbildung - d.h. der Übergang von HC-Verbindungen mit einigen wenigen Kohlenstoffatomen zu einer Agglomeration von vielen tausend Atomen - ist das Ergebnis eines hochkomplexen physikalischen und chemischen Vorgangs mit hunderten von Reaktionen und Zwischen-Spezies. Im Modell werden die Gasphasenreaktionen nach einem komplexen Mechanismus berechnet, welcher 89 Spezies und 855 Reaktionen berücksichtigt. Durch die Bildung von Benzol, das den Reaktionsverlauf von Russ maßgeblich beeinflusst, wird anhand chemischer und physikalischer Prozesse die Bildung erster Russpartikel über die Koagulation von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAH) bestimmt. Die Oxidation der gebildeten Russmasse berechnet sich auf Basis des molekularen Sauerstoffs und unter Einbezug von Hydroxyl-Radikalen (OH-Radikal).

## 4 Verbessertes Simulationmodell für Stickoxid

### 4.1 Einflussgrößen und Modellverbesserungen

Dieses Kapitel behandelt die auf das NO-Modell von Pattas und Häfner wirkenden Einflussgrößen in einer nulldimensionalen Entwicklungsumgebung. Hierbei stehen die turbulente kinetische Energiedichte, Geschwindigkeitskonstanten und stöchiometrischer Luftbedarf im Vordergrund. Besonders die turbulente kinetische Energiedichte  $k$ , hervorgerufen durch den Impulseintrag der Einspritzstrahlen, zeigt große Wirkung auf Gemisch- und Schadstoffbildungsprozesse bei DI-Dieselmotoren [71][75][76].

#### 4.1.1 Theorie der turbulenten kinetischen Energiedichte

Nachfolgende Gleichungen erklären zunächst die turbulente kinetische Energiedichte  $k$  und die Herleitung der Molekülstoßfrequenz  $f$ . Im Anschluss wird auf die entscheidenden Modellverbesserungen eingegangen.

Bereits *Magnussen* [74] stellte bei seinen Untersuchungen an freien Diffusionsflammen fest, dass die Mischung von Sauerstoff und Kraftstoff über Mischungsvorgänge auf molekularer Ebene chemische Reaktionen beeinflusst. Auch *Chmela* [29] unterstrich den Einfluss der turbulenten kinetischen Energiedichte  $k$  auf die Mischungsgeschwindigkeit und den Verbrennungsablauf im Dieselmotor.

Ein Ansatz zur Berechnung der kinetischen Energie in einer null- und dreidimensionalen Entwicklungsumgebung erfolgt aus dem überwiegenden Anteil des Impulses der Einspritzstrahlen [71]. Unter Berücksichtigung von Einspritzrate und Düsengeometrie lautet eine allgemeine Formulierung für die kinetische Energie wie folgt:

$$\frac{dE_{kin}}{dt} = \frac{\rho_K \cdot w^2}{2} \frac{dV_K}{dt} \quad (4-1)$$

Die turbulente kinetische Energiedichte lässt sich schließlich durch den Bezug der kinetischen Energie auf die momentane Gemischmasse und unter Berücksichtigung einer Konstante berechnen [29][71] (vgl. Gleichung (4-2)).

$$k = C_{Turb} \cdot \frac{E_{kin}}{m_K \cdot (1 + \lambda_{Diff} \cdot L_{min})} \quad (4-2)$$

Mit Hilfe der Reaktionsrate nach *Magnussen* [74] und einer Beschreibung der Dissipation durch einen charakteristischen Längenmaßstab nach Taylor für eine nulldimensionale Umgebung, kann der Mischungskontrollierte Teil der Diffusionsverbrennung im DCM-Modell nach *Pirker* [76] wie folgt berechnet werden:

$$\frac{dQ_{diff}}{dt} = C_{Mod} \cdot H_u \cdot m_{diff,verf} \cdot \frac{\varepsilon}{k} = C_{Mod} \cdot H_u \cdot m_{diff,verf} \cdot \frac{\sqrt{k}}{l} \quad (4-3)$$

Die charakteristische Länge  $l$  entspricht bei Hubmotoren der dritten Wurzel des Hubvolumens, da dadurch die Dissipation  $\varepsilon$  über die spezifische Molekülgeschwindigkeit ausgedrückt werden kann.

Durch den Bezug der Transportgeschwindigkeit  $\sqrt{k}$  auf einen charakteristischen Längenmaßstab bzw. das Hubvolumen kann der Einfluss der veränderlichen Ladungsdichte und damit der Stoßfrequenz der Moleküle  $f$  nach Gleichung (4-4) ausgedrückt werden.

$$f = \frac{\sqrt{k}}{\sqrt[3]{V_{Cyl}}} \quad (4-4)$$

Wegen dieser Überlegungen ist es daher naheliegend, aufgrund der Verschränkung zwischen lokaler Turbulenzdichte  $k$  und Verbrennung den Einfluss der Stoßfrequenz  $f$  auch im NO-Modell zu überprüfen.

#### 4.1.2 Einfluss der Stoßfrequenz auf die Berechnung von Stickoxid

Wie schon *Magnussen* eine Wirkung der Turbulenz auf Mischungszeit und damit die Verbrennung feststellte, so bemerkte auch *Kyriakides* [38] einen entscheidenden Einfluss der Reaktionsrate auf die Verbrennung und die daraus resultierende Bildung von Schadstoffen. Auch *Engelmayer* [71] stellte eine Wirkung der Turbulenzdichte  $k$  auf die NO-Bildung fest, allerdings für andere Motoren und Einspritzsysteme.

Um den Einfluss der kinetischen Energiedichte auf die Berechnung von Stickoxid überprüfen zu können, wurde die Stoßfrequenz  $f$  im NO-Modell von Pattas integriert. Ausführliche Vergleiche zwischen Messung und Simulation mit und ohne Stoßfrequenz sollen zur Untermauerung der Hypothese herangezogen werden.

Auf der Grundlage von Gleichung (3-25) wurde deshalb der Formalismus für die NO-Bildung um die Stoßfrequenz  $f$  erweitert, um dessen Auswirkungen anhand von typischen Betriebspunkten eines mittelschnelllaufenden Großdieselmotors beurteilen zu können. Weiters wurde noch eine innere Konstante in Gleichung (4-5) hinzugefügt.

$$\frac{d[NO]}{dt} = C_{NO_{kin}} \cdot \frac{\sqrt{k}}{V_{cyl}^{1/3}} \cdot 2 \cdot (1 - \alpha^2) \cdot \left( \frac{R_{1,G}}{1 + \alpha \cdot K_2} + \frac{R_{4,G}}{1 + K_4} \right) \quad (4-5)$$

Der Sinn der zusätzlichen Konstante besteht darin, mit Hilfe von  $C_{NO_{kin}}$  die Wirkung der turbulenten kinetischen Energiedichte abzuschwächen bzw. zu verstärken. Eine äußere Konstante dient als Skalierfaktor zur Adaptierung des Modells an Messungen.

Die Beurteilung der Wirkung der Stoßfrequenz  $f$  auf die NO-Bildung erfolgte zunächst anhand einer Einspritzdruckvariation für Voll- und Teillast. Damit soll die Sensitivität der Turbulenzdichte  $k$  auf die Reaktionskinetik überprüft werden. Zusätzlich wurden noch Simulationen für eine Einspritzdruckvariation mit konstanter AGR-Rate durchgeführt, um auch die Sensitivität des NO-Modells auf den AGR-Effekt zu überprüfen [12][35].

Abbildung 4-1 zeigt die Ergebnisse der NO-Simulation mit und ohne Turbulenzterm für eine Einspritzdruckvariation in Kombination mit und ohne AGR. Als zusätzlicher Parameter wurde die Motorlast verändert. Die Korrelation des Modells mit der Messung soll anhand dieser Problematik beurteilt werden.

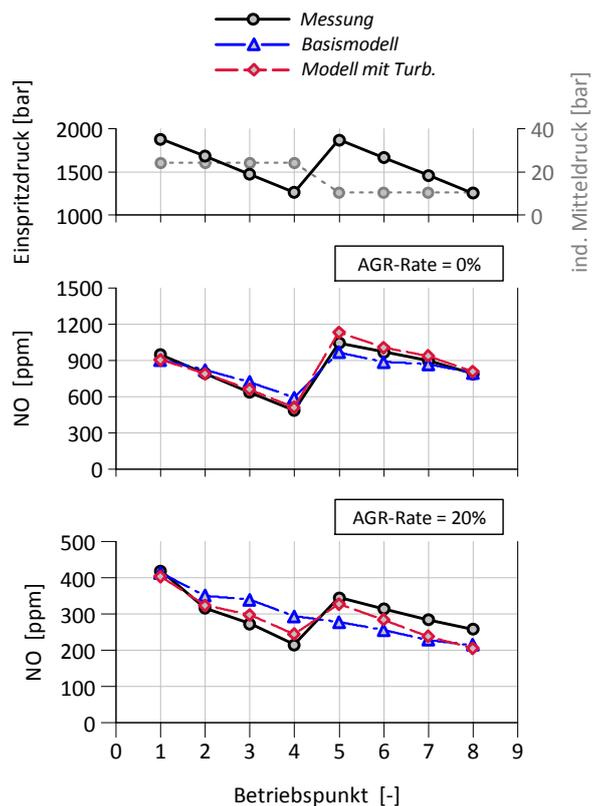


Abbildung 4-1: Einfluss der Turbulenz auf die NO-Berechnung mit/ohne AGR

Wie aus Abbildung 4-1 ersichtlich, zeigt das NO-Modell mit Turbulenzterm für die Einspritzdruckvariation ohne AGR eine bessere Übereinstimmung mit der Messung als das Basismodell. Noch deutlicher ist die Reaktion des NO-Modells auf eine Änderung der durch die AGR hervorgerufene Ladungszusammensetzung. Aufgrund der Abnahme der  $O_2$ -Konzentration tritt ein deutlicher Rückgang von Stickoxid im Abgas auf. Das NO-Modell ohne Turbulenzterm kann diesen Effekt über die Motorlast nicht genau genug abbilden. Das Modell mit Turbulenzterm zeigt hingegen eine qualitativ viel bessere Übereinstimmung zur Messung. Die integrierte Molekül-Stoßfrequenz  $f$  im NO-Modell ermöglicht hingegen eine wesentlich bessere Korrelation zwischen Messung und Simulation. Abbildung 4-2 zeigt noch einen Vergleich zwischen NO-Messung und NO-Rechnung für die zuvor beschriebene Variation. Die Sensitivität des Modells mit und ohne Stoßfrequenz  $f$  und die Größe des relativen Fehlers ist auch in der Abbildung ersichtlich.

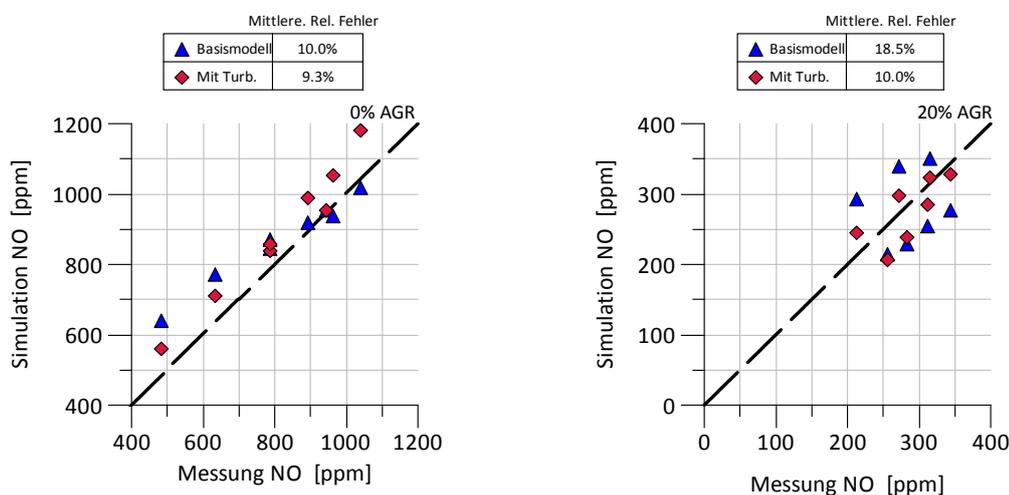


Abbildung 4-2: Vergleich der NO-Simulation mit und ohne Stoßfrequenz

Wie aus Abbildung 4-2 hervorgeht, weist das NO-Modell mit Stoßfrequenz  $f$  für die Variation ohne AGR nur eine geringe Verbesserung in Bezug auf den relativen Fehler auf. Im Gegensatz dazu ist ein eindeutiger linearer Trend des Modells mit Turbulenzterm im Vergleich zur Messung feststellbar. Eine wesentlich größere Auswirkung zeigt das NO-Modell mit Stoßfrequenz  $f$  wenn AGR appliziert wird. Hier ist nicht nur eine Verringerung des relativen Fehlers erkennbar, sondern auch eine wesentlich bessere Korrelation mit der Messung. Die Berücksichtigung der Stoßfrequenz  $f$  stellt deshalb einen maßgebenden Einfluss auf die Reaktionskinetik dar. Die Berücksichtigung des Turbulenzterms im NO-Modell führt zu einer wesentlichen Verbesserung der Ergebnisqualität. Die Wirkung der AGR kann mit dem erweiterten Modell über der Motorlast besser dargestellt werden.

Um den Einfluss der Molekül-Stoßfrequenz auch für eine variable AGR-Rate beurteilen zu können, wurden Simulationen für variable Last und konstanten Einspritzdruck durchgeführt. Abbildung 4-3 zeigt einen Vergleich zwischen Messung und Simulation für die eben beschriebene Variation. Eine Gegenüberstellung des relativen Fehlers für das Basis- und das verbesserte Modell ist ebenfalls in der Abbildung dargestellt.

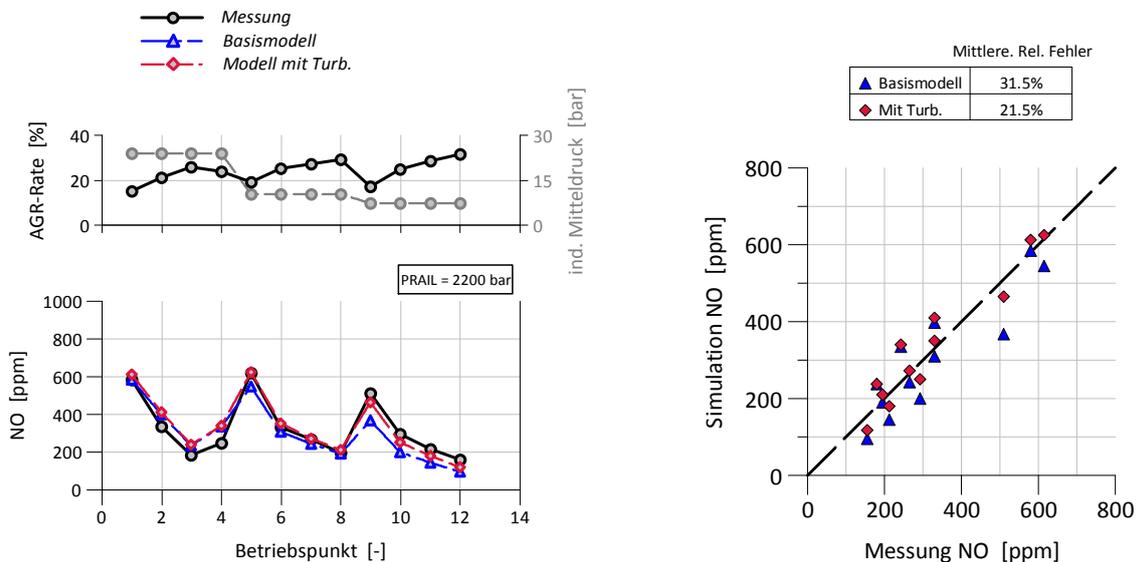


Abbildung 4-3: Vergleich der NO-Simulation bei Variation der AGR-Rate über die Last

Für konstanten Einspritzdruck und variable AGR-Rate ist eine deutlich verbesserte Qualität der Simulation unter Berücksichtigung der Stoßfrequenz  $f$  sichtbar. Aufgrund der Wirkung des zusätzlichen Faktors auf die Reaktionskinetik kann vor allem für Betriebspunkte in der unteren Teillast eine zu starke Rückbildung - also eine indirekte Korrektur von Augenblicks- zu Gleichgewichtskonzentration über den Parameter  $\alpha$  erreicht werden.

Der Vergleich zwischen Messung und Simulation spiegelt für das Modell mit integrierter Stoßfrequenz  $f$  eine Verbesserung des relativen Fehlers von 10%-Punkten gegenüber dem Basismodell wider.

### 4.1.3 Wirkung des Mindestluftbedarfs und Einfluss auf die Stoßfrequenz

Die im Abschnitt zuvor erklärten Ergebnisse veranschaulichen einen wesentlichen Einfluss der AGR-Rate bzw. der Ladungsverdünnung auf die Berechnung von Stickoxid. Um die Qualität des Modells weiter zu verbessern, wurde versucht, über einen zusätzlichen Faktor die Wirkung von AGR im Modell noch besser darzustellen.

Die Rückführung von AGR bewirkt ein Absinken des Massenanteils von  $O_2$  in der angesaugten Luftmasse, da eine Substitution durch die Gase  $CO_2$  und  $H_2O$  stattfindet. Dies führt in weiterer Folge dazu, dass aufgrund des geringeren Einlass- $O_2$  Gehalts ein erhöhter stöchiometrischer Luftbedarf für die Verbrennung notwendig wird [35]. Wie bereits im Kapitel zuvor erläutert, wird sowohl im nulldimensionalen Brennratenmodell als auch im verbesserten NO-Modell die Dissipation  $\varepsilon$  durch den Bezug auf einen charakteristischen Längenmaßstab abgebildet. Damit wird auch im NO-Modell die veränderliche Ladungsdichte über den mittleren Molekülabstand berücksichtigt. Der Einfluss der durch die AGR hervorgerufenen Ladungsverdünnung findet allerdings durch diesen Zusammenhang keine Wiedergabe.

Folglich muss eine Formulierung gefunden werden, die den AGR-Einfluss besser beschreibt, da dieser die Stoßfrequenz  $f$  und damit die Gaskinetik beeinflusst [85]. Ein Parameter, welcher sich dafür anbieten würde, wäre der stöchiometrische Luftbedarf. Dieser beinhaltet den korrigierten  $O_2$ -Masseanteil für AGR. Durch die Berücksichtigung des Quotienten des stöchiometrischen Mindestluftbedarfs mit und ohne Verdünnung in der NO-Differentialgleichung lässt sich somit eine verbesserte Abbildung der AGR auf die Reaktionskinetik im NO-Modell sicherstellen (vgl. Abbildung 4-4). Dieser Korrekturterm wurde auch schon in [75] für die Abhängigkeit der Brennrate von der AGR-Rate eingesetzt.

Gleichung (4-6) zeigt die NO-Differentialgleichung mit zusätzlich integriertem AGR-Korrekturterm. Der stöchiometrische Mindestluftbedarf für AGR befindet sich im Nenner um die Wirkung auf die NO-Bildung im Teillastbereich zu verstärken.

$$\frac{d[NO]}{dt} = C_{NO_{kin}} \cdot \frac{\sqrt{k}}{V_{cyl}^{1/3}} \cdot \frac{L_{stoch}}{L_{stoch,AGR}} \cdot 2 \cdot (1 - \alpha^2) \cdot \left( \frac{R_{1,G}}{1 + \alpha \cdot K_2} + \frac{R_{4,G}}{1 + K_4} \right) \quad (4-6)$$

Die Wirkung der integrierten Stoßfrequenz in der NO-Differentialgleichung wurde anhand der bereits gezeigten Raildruckvariation mit AGR über der Motorlast getestet. Die Simulationsergebnisse weisen eine deutliche Verbesserung mit integrierter Molekül-Stoßfrequenz auf – wenngleich die Teillast noch Verbesserungspotential besitzt. Der zusätzliche Term in der Differentialgleichung stellt eine weitere indirekte Korrektur des Faktors  $\alpha$  dar, welcher über den Quotienten von Augenblickskonzentration zur Gleichgewichtskonzentration den Bildungs- und Zerfallsprozess von NO maßgeblich beeinflusst.

Abbildung 4-4 zeigt anhand der zuvor vorgestellten Lastvariation die Auswirkungen auf die NO-Simulation mit korrigierter Stoßfrequenz unter Berücksichtigung des zusätzlichen AGR-Terms. Die Zahlenwerte der im Modell verwendeten Konstanten wurden konstant gehalten, um die Auswirkung des neuen Terms bewerten zu können.

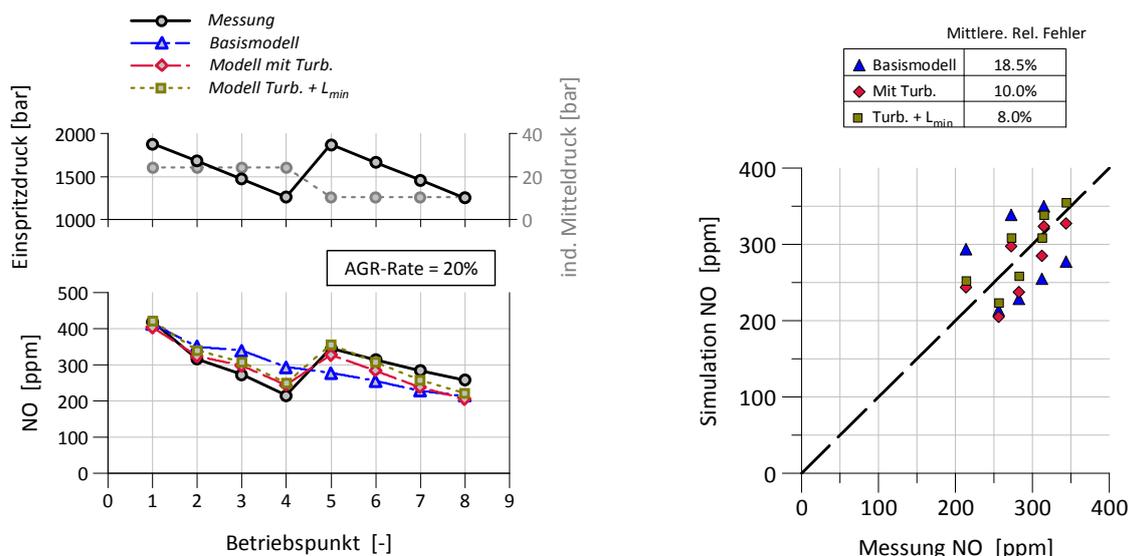


Abbildung 4-4: Wirkung der korrigierten Stoßfrequenz auf die NO-Simulation

Wie aus der Abbildung 4-4 ersichtlich, stellt der zusätzliche AGR-Korrekturterm eine weitere Verbesserung dar. Vor allem für die Teillast kann eine noch bessere Korrelation mit der Messung erreicht werden. Der relative Fehler konnte ebenfalls um weitere 2% verringert werden. Folglich stellt die Berücksichtigung des stöchiometrischen Luftbedarfs in der NO-Differentialgleichung eine zusätzliche Möglichkeit zur Verbesserung der Abbildungsgenauigkeit von Stickoxid dar.

#### 4.1.4 Einfluss der Geschwindigkeitskonstanten

In der Literatur existieren zahlreiche reaktionskinetische Modelle für die Berechnung von Stickoxid. Unsicherheiten bestehen nach wie vor bei der Wahl der geeigneten Gleichgewichtskonstanten und der Anzahl der Reaktionsgleichungen. Nach *Stiesch* [33] führt allerdings eine Erweiterung der Reaktionsgleichungen und der involvierten chemischen Spezies, wie dies z.B. *Miller* und *Davis* [66] in ihrer Arbeit durchführten, zu keiner wesentlichen Verbesserung in der Ergebnisqualität, jedoch zu längeren Rechenzeiten. Um weitere Verbesserungen in der Simulationsqualität zu erreichen, wurden die für die NO-Hinreaktion relevanten Gleichgewichtskonstanten näher untersucht.

Das in dieser Arbeit eingesetzte NO-Modell verwendet statistisch gemittelte Geschwindigkeitskonstanten von *Pattas*. Möglicherweise entsprechen diese aktuellen Anforderungen nicht mehr. Aus diesem Grund wurden Geschwindigkeitskonstanten anderer Autoren ausgewählt und deren Auswirkungen mit dem NO-Basismodell getestet. Die zuvor beschriebenen Verbesserungspotentiale wie Turbulenz und Mindestluftbedarf finden vorerst keine Berücksichtigung.

Tabelle 4-1 zeigt die dem Test zu Grunde liegenden Geschwindigkeitskonstanten für die erste Hinreaktionen des Zeldovich-Mechanismus. Aufgrund der dominierenden Wirkung der ersten Hinreaktion auf den Gesamtumsatz von Stickoxid wurde nur diese Gleichung untersucht.

Reaktion $i$	$k_{i,v} [cm^3/mol s]$	Autor
$N_2 + O \xrightleftharpoons{k_1} NO + N$	$k_{1v} = 4.93 \cdot 10^{13} \cdot T^{0.047} \cdot e^{\left(\frac{-38065}{T}\right)}$	Pattas (1973)
	$k_{1v} = 2.00 \cdot 10^{14} \cdot e^{\left(\frac{-38660}{T}\right)}$	Baulch et al. (1991)
	$k_{1v} = 0.544 \cdot T^{0.1} \cdot 10^{14} \cdot e^{\left(\frac{-38020}{T}\right)}$	Gri-Mech (2000)
	$k_{1v} = 0.76 \cdot 10^{14} \cdot e^{\left(\frac{-38000}{T}\right)}$	Heywood (1988)

Tabelle 4-1: Geschwindigkeitskonstanten für die erste Hinreaktion nach [23]

Anhand einer typischen Lastvariation mit AGR, bei der ein Einfrieren der NO-Reaktion mit dem ursprünglichen Modell von Pattas zu beobachten ist, wurde der Einfluss unterschiedlicher Geschwindigkeitskonstanten untersucht. Die Ergebnisse für diese Variation über der Last sind in Abbildung 4-5 für 14 Motorbetriebspunkte dargestellt. Die Darstellung im linken Diagramm beschreibt den Verlauf der NO-Konzentration zwischen Messung und Simulation. Das rechte Diagramm zeigt die Summe des auftretenden mittleren relativen Fehlers aller Betriebspunkte für die verwendeten Geschwindigkeitskonstanten.

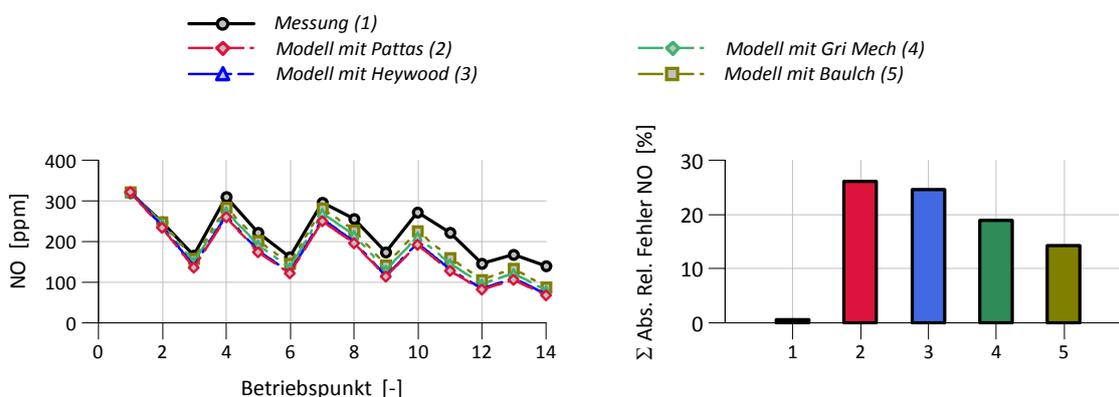


Abbildung 4-5: Einfluss der Geschwindigkeitskonstante auf die NO-Konzentration

Die Ergebnisse der untersuchten Lastvariation machen deutlich, dass das NO-Modell auch mit veränderten Geschwindigkeitskonstanten den Trend über der Last nicht einwandfrei abbildet. Aufgrund der höheren präexponentiellen Faktoren und der Aktivierungsenergie ist vor allem beim Ansatz nach *Baulch* eine Verbesserung in der Genauigkeit der Simulation erkennbar. Die Abweichung des relativen Fehlers der NO-Konzentration liegt beim Ansatz von *Baulch* bei 14%, bei *Pattas* hingegen bei mehr als 25%.

Für eine noch bessere Abbildung des Trends mit der Simulation sind jedoch zusätzliche Maßnahmen erforderlich, wie z.B. die Berücksichtigung von Turbulenz- und AGR-Term in der Differentialgleichung. Die Adaptierung der präexponentiellen Faktoren und der Aktivierungsenergie stellt in Kombination mit den in den Abschnitten zuvor beschriebenen Maßnahmen eine weitere Optimierungsmöglichkeit dar.

### 4.1.5 Örtliches Luftverhältnis

Wie schon in der Einleitung erwähnt, erfolgt die Berechnung der thermodynamischen Größen und der Brennrate auf Basis des nulldimensionalen Prozessrechenprogramms CATO [71]. Das diesem Programm zugrunde gelegte Zweizonenmodell benötigt für den Stofftransport von der Frischgaszone in die verbrannte Zone eine Information über den Verlauf des lokalen Luftverhältnisses. Der Verlauf dieses Luftverhältnisses ist eine Annahme und unterscheidet sich je nach Modellphilosophie. In CATO wird nach *Engelmayer* [71] der Verlauf für die Dauer der Einspritzung mit  $\lambda=1$  angenommen und anschließend bis zum Brennende über eine Funktion an das globale Luftverhältnis herangeführt. Auch *Kraßnig* [86] legt der Stickoxidbildung einen variablen Lambdaverlauf zu Grunde und begründet dies mit der Ähnlichkeit der Temperaturverläufe zu Flammtemperaturmessungen. *Pötsch* [77] geht hingegen in seinem Multi-Zonen Verbrennungsmodell von einem lokal stöchiometrischen Luftverhältnis aus.

Zur Überprüfung der Modellphilosophie wurde mit der Motorprozessrechnung die Auswirkung des lokalen Luftverhältnisses auf Verbrennung und Stickoxidbildung untersucht. Abbildung 4-6 zeigt die beschriebenen Zusammenhänge für zwei Betriebspunkte mit unterschiedlicher Leistung und Drehzahl anhand verschiedener lokaler Luftverhältnisse. Die Berechnung der Energieumsetzung erfolgte auf Basis eines gemessenen Zylinderdruckverlaufs zunächst anhand eines variablen Luftverhältnisses. Für die übrigen Fälle wurde dem verbrennenden Kraftstoffelement ein stöchiometrisches und anschließend ein überstöchiometrisches Luftverhältnis für die Dauer von Spritzbeginn bis Brennende zu Grunde gelegt.

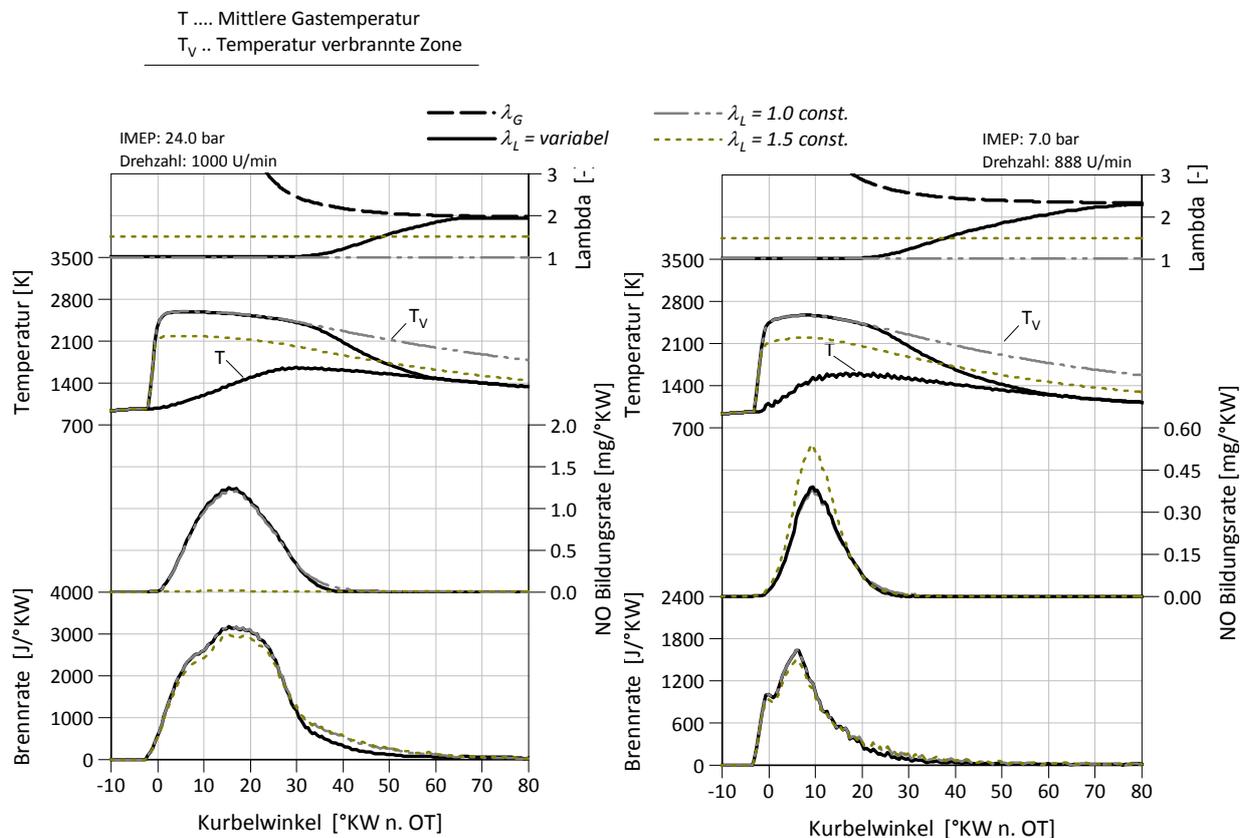


Abbildung 4-6: Brennraten- und NO-Bildungsrate in Abhängigkeit vom lokalen Luftverhältnis für Voll- und Teillast

Der Vergleich der Brennraten und Stickoxidkonzentration des Volllastpunkts zeigt kaum Unterschiede für stöchiometrisch variablen und stöchiometrisch konstanten Lambdaverlauf. Trotz der wesentlich höheren Temperatur in der verbrannten Zone bei konstantem Luftverhältnis sind keine Auswirkungen auf die Stickoxidbildung erkennbar. Dies hängt damit zusammen, dass aufgrund der fallenden Temperatur während der Expansionsphase des Kolbens ein Einfrieren der Reaktionen ab etwa 35° KW nach OT stattfindet. Die für die restliche Expansionsphase zur Verfügung stehende höhere Temperatur bei konstantem Luftverhältnis mit  $\lambda=1$  hat auf die Stickoxidbildung keinen Einfluss. Der überstöchiometrische Lambdaverlauf zeigt ebenfalls nur geringe Auswirkung auf die Brennrate und hat keinen Einfluss auf die NO-Bildung. Die wesentlich geringere Zonentemperatur der verbrannten Ladung reicht nicht aus, um eine Bildung von NO einzuleiten.

Die Prozessrechenergebnisse für die Teillast ähneln jenen der Volllast. Auch hier sind für variables und konstant stöchiometrisches Luftverhältnis geringe Auswirkungen auf Brennrate und Stickoxidbildung erkennbar. In Analogie zum Volllastpunkt tritt aufgrund der Expansionsphase des Kolbens ein Einfrieren der Reaktionen ca. 25° KW nach OT ein. Das anschließende höhere Temperaturniveau für konstantes  $\lambda=1$  kommt deshalb nicht mehr zur Geltung. Im Gegensatz zur Volllast zeigt das überstöchiometrische Luftverhältnis in der Teillast bedingt durch die längere Verweilzeit eine erhöhte NO-Konzentration.

Anhand der beschriebenen Zusammenhänge zwischen lokalem Luftverhältnis und Verbrennung soll nachfolgend mittels einer Lastvariation mit AGR die Auswirkung auf das NO-Modell beurteilt werden. Abbildung 4-7 zeigt die Ergebnisse für Stickoxid auf Basis verschiedener lokaler Luftverhältnisse. Die Kalibrierung des Modells erfolgte wieder anhand des Volllastpunktes (Messpunkt 1) ohne Berücksichtigung von Turbulenz und Mindestluftbedarf.

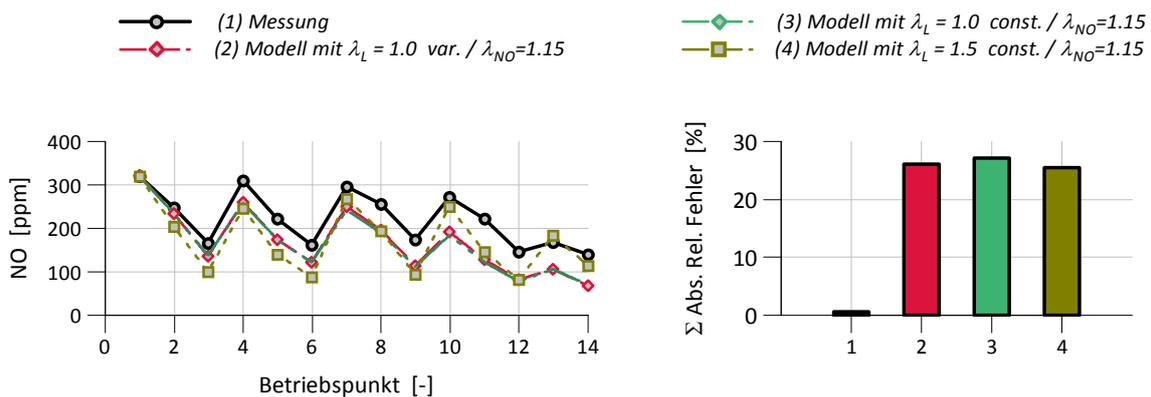


Abbildung 4-7: Einfluss des lokalen Luftverhältnisses im 2-Zonenmodells auf NO

Wie aus den Ergebnissen ersichtlich, führen unterschiedliche lokale Verbrennungsluftverhältnisse im Zwei-Zonenmodell zu keiner wesentlichen besseren Prognose von Stickoxid. Da die adiabate Flammentemperatur bei  $\lambda=1$  ihr Maximum aufweist, die thermische NO-Bildung aber bei einem lokalen Luftverhältnis von  $\lambda=1.15$  maximal ist [20], wird für die zukünftige Berechnung der relevanten Verbrennungstemperatur ein stöchiometrisches Luftverhältnis nach *Engelmayer* [71] und für das NO-Modell ein lokales Luftverhältnis von  $\lambda=1.15$  zu Grunde gelegt.

## 4.2 Verifikation

Die Ausgangsbasis für die finale Modellabstimmung stellt die unter Berücksichtigung von Turbulenz und Mindestluftbedarf korrigierte NO-Differentialgleichung nach Formel (4-6) dar. Die Ergebnisse in Kapitel 4.1.4 belegen, dass präexponentielle Faktoren ( $A$ ,  $b$ ) und die Aktivierungsenergie  $E_a$  auf das NO-Modell eine Auswirkung haben. Aus diesem Grund wurde in der Literatur nach neueren Konstanten gesucht und versucht, diese so gut wie möglich an die Gegebenheiten und die aktuelle Problemstellung anzupassen. Gleichung (4-7) zeigt die für die Optimierung relevanten Konstanten  $A$  und  $b$  sowie die Aktivierungsenergie  $E_a$  für die Berechnung der Geschwindigkeitskonstante nach dem Ansatz von Arrhenius.

$$k = A \cdot T^b \cdot e^{\frac{-E_a}{R_m \cdot T}} \quad (4-7)$$

Der notwendige Optimierungsprozess der abzustimmenden Modellparameter erfolgte zunächst händisch. Eine eigens am LEC entwickelte automatisierte Optimierungsroutine [21] lieferte für die präexponentiellen Konstanten und die Aktivierungsenergie keine vernünftigen Ergebnisse. Eine automatisierte Optimierung war nur anhand der äußeren Konstante  $C_{NO_{out}}$  möglich.

Der detaillierten Abstimmung der Konstanten im NO-Modell liegt nachfolgende Vorgehensweise zu Grunde:

- Anpassung der präexponentiellen Faktoren  $A$  und  $b$
- Anpassung der Aktivierungsenergie  $E_a$
- Verstärkung bzw. Abschwächung des Einflusses von Turbulenzdichte  $k$  und Mindestluftbedarf  $L_{min}$  über die innere Konstante  $C_{NO_{kin}}$
- Anpassung des Absolutniveaus der Simulation an die Messung mit Hilfe einer äußeren Konstante  $C_{NO_{out}}$

Um die Auswirkungen unterschiedlicher präexponentieller Faktoren und Aktivierungsenergien anhand umfangreicher Parametervariationen beurteilen zu können, wurden aus der Literatur aktuellere Zahlenwerte für die Konstanten der Arrhenius-Gleichung entnommen [87]. Eine abschließende Beurteilung des NO-Modells setzt eine Validierung der neuen Konstanten mit Messungen voraus. Für die finalen Vergleiche mit veränderten Arrhenius-Konstanten findet die Molekül-Stoßfrequenz  $f$  und der Mindestluftbedarf  $L_{min}$  im Modell Berücksichtigung.

An dieser Stelle sei erwähnt, dass die innere Modellkonstante für den Vergleich nicht verändert wurde. Es gelang, eine eigenständige Formulierung für die Arrhenius-Konstanten zu finden. Durch umfangreiche Untersuchungen wurde schließlich eine Formulierung gefunden, die eine gute Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation ermöglichte (vgl. Tabelle 4-2). Nachfolgende Abbildung 4-8 zeigt die Simulationsergebnisse mit veränderten Arrhenius-Konstanten im Vergleich zum Basismodell.

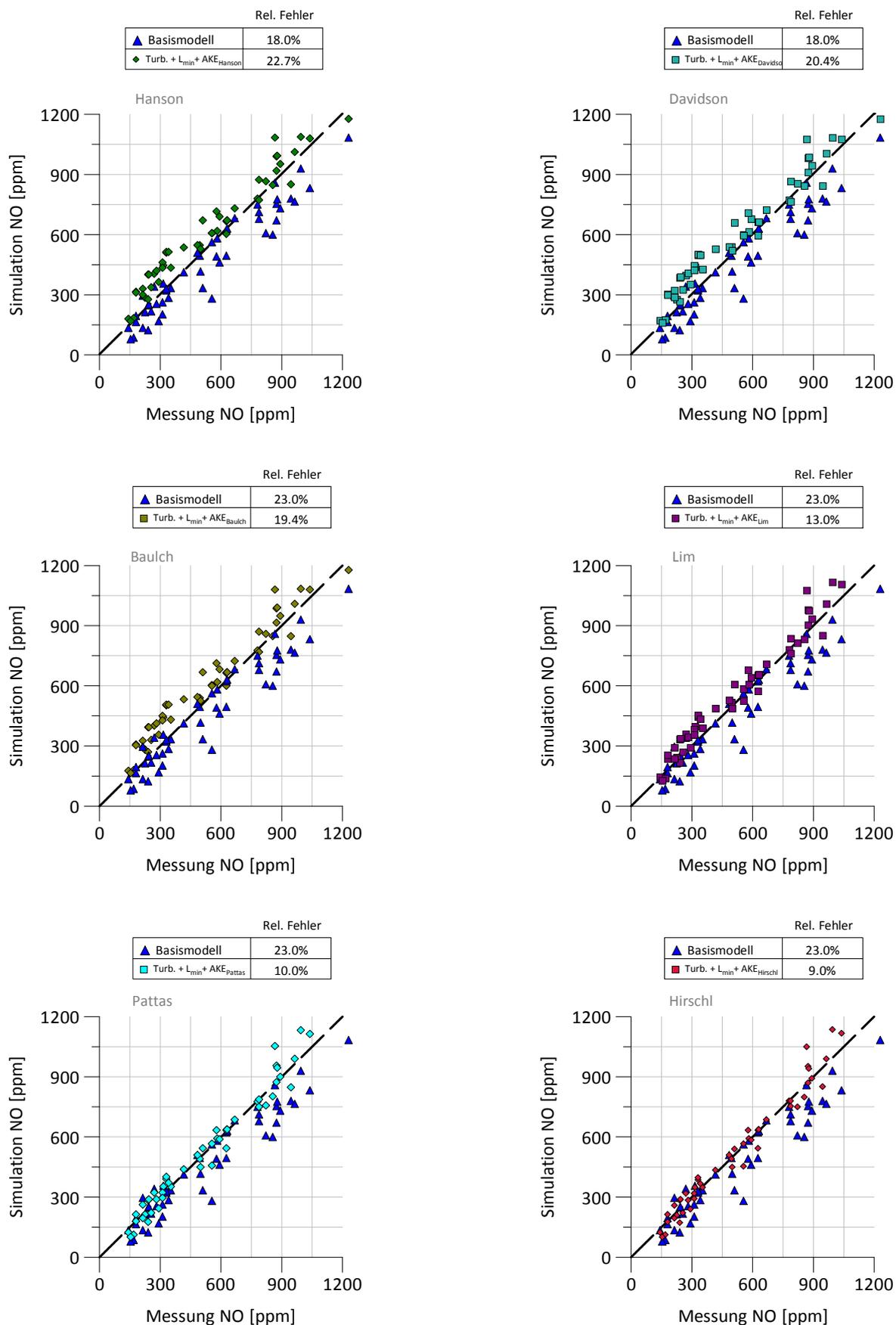


Abbildung 4-8: Übereinstimmung zwischen NO-Messung und NO-Simulation für unterschiedliche präexponentielle Faktoren und Aktivierungsenergien

Anhand der Vergleiche ist erkennbar, dass das korrigierte NO-Modell mit angepasster Molekül-Stoßfrequenz und den ursprünglich von Pattas vorgeschlagenen Konstanten einen relativen Fehler von ca. 10% aufweist. Die Modellkonstanten anderer Autoren zeigen hingegen einen wesentlich größeren relativen Fehler (vgl. Abbildung 4-8). Mit der neuen Formulierung für die Geschwindigkeitskonstante konnte eine weitere Verbesserung erreicht werden. Aufgrund dessen sind die im Kapitel 4.1.2 und 4.1.3 beschriebenen Einflussgrößen in Kombination mit den „richtigen“ Geschwindigkeitskonstanten entscheidend für eine optimierte Abbildung von Stickoxid. Zu hohe präexponentielle Faktoren und Aktivierungsenergien wie z.B. jene von *Baulch* oder *Hanson* weisen mit berücksichtigter Molekülstoßfrequenz  $f$  eine wesentliche Verschlechterung auf und sind daher nicht zu empfehlen. Tabelle 4-2 legt die verwendeten präexponentiellen Faktoren und Geschwindigkeitskonstanten der einzelnen Autoren für die zuvor beschriebenen Vergleiche dar. Aufgrund der zuvor gezeigten Ergebnisse wird die Verwendung der präexponentiellen Faktoren und Aktivierungsenergie nach *Pattas* oder *Hirschl* empfohlen.

Reaktion $i$	Autor	Jahr	$A$ [cm <sup>3</sup> /mol s]	$B$ [-]	$E_a$ [J/mol]
$N_2 + O \xrightleftharpoons{k_1} NO + N$	Pattas	1973	$4.93 \cdot 10^{13}$	0.0472	38065
	Hanson	1984	$1.80 \cdot 10^{14}$	0	38300
	Davidson	1990	$1.95 \cdot 10^{14}$	0	38660
	Baulch	1991	$2.00 \cdot 10^{14}$	0	38660
	Michael & Lim	1992	$1.00 \cdot 10^{14}$	0	37988
	Hirschl	2013	$0.50 \cdot 10^{14}$	0	37440

Tabelle 4-2: Vergleich unterschiedlicher präexponentieller Faktoren und Aktivierungsenergien zur Berechnung von Stickoxid

Einen abschließenden Vergleich des Basismodells zum verbesserten Modell mit integrierter Stoßfrequenz  $f$  und der Formulierung für die Geschwindigkeitskonstante nach *Hirschl* zeigt Abbildung 4-9. Hierfür wurde die Simulationsgüte des NO-Modells anhand von Betriebspunkten für relevante Entwicklungsparameter der Brennverfahrensentwicklung untersucht.

Die für den Vergleich ausgewählten Versuchsergebnisse repräsentieren ein breites Emissionsspektrum, dessen Prognose durch das Modell ein wesentliches Entwicklungsziel darstellte. Der obere Bildteil beschreibt die Änderung des Mitteldrucks und der AGR-Rate über der Motorlast, der untere Bildteil den Vergleich zwischen Messung und Simulation. Die simulatorischen Vergleiche belegen für das verbesserte NO-Modell eine wesentlich bessere Abbildung des Trends über der Last. Ebenso werden Änderungen des Einspritzdrucks (Variation 10) und der AGR-Rate (Variation 11-13) für den Teillastbereich vom Modell deutlich besser dargestellt. Auch für das sehr niedrige Emissionsniveau (150 ppm bis 300 ppm) verzeichnet das optimierte Modell eine sehr gute Korrelation mit der Messung und gleichfalls für hohe NO-Emissionswerte.

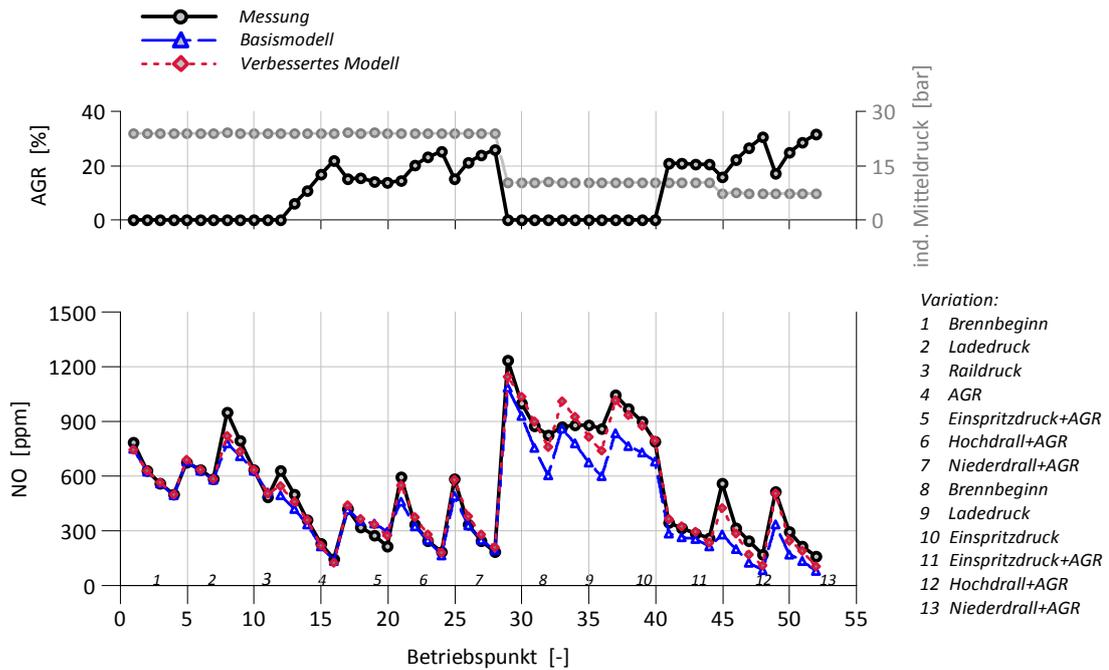


Abbildung 4-9 : Vergleich zwischen NO-Messung und NO-Simulation anhand von lastabhängigen Parametervariationen

Die im NO-Modell integrierten Adaptierungen wie z.B. turbulente kinetische Energiedichte  $k$  und Mindestluftbedarf  $L_{min}$  zeugen von einer eindeutigen Verbesserung der reaktionskinetischen Berechnung von Stickoxid. Einzig die Variation des Ladedrucks in der Teillast konnte auch vom verbesserten Modell nicht besser abgebildet werden. In Summe gesehen ermöglichen die Modellverbesserungen eine verbesserte Vorausberechnung von Stickoxid in einer nulldimensionalen Entwicklungsumgebung.

## 5 Die Einspritzrate als Grundlage für die Simulation der dieselmotorischen Verbrennung

Die Einspritzrate stellt als Grundlage für die Simulation der Dieselerverbrennung eine der wichtigsten Eingangsgrößen für die Simulation dar. Der zeitliche Verlauf der Energieumsetzung im Verbrennungsmotor ist entscheidend für Wirkungsgrad und Emissionen. Im Dieselmotor bestimmt der Einspritzvorgang die zeitliche Energieumsetzung und Schadstoffbildung. Bei Simulationsmodellen zur Berechnung von Brennverlauf und Emissionen hängt die Ergebnisqualität sehr stark von der zugrunde gelegten Form des Einspritzverlaufs ab [63].

### 5.1 Bedeutung der Einspritzrate

Zur Verbesserung des Emissionsverhaltens direkt einspritzender Dieselmotoren spielt in der Verbrennungsentwicklung die Simulation eine entscheidende Rolle. Die Teilprozesse der dieselmotorischen Gemischbildung und Verbrennung beginnen mit der Einspritzung und Zerstäubung des Kraftstoffs in den Brennraum [23]. Die Ladungsturbulenz, also insbesondere die Dichte der turbulenten kinetischen Energie im Zylinder, wird dabei in direkt einspritzenden Dieselmotoren zum überwiegenden Teil aus dem Impuls der Einspritzstrahlen und nur im geringen Ausmaß über Kanal- und Quetschströmungen erzeugt.

Da der Einspritzvorgang am Beginn der Wirkkette steht, ist der zeitliche Verlauf der Kraftstoffeinbringung in den Zylinder von hoher Bedeutung für Energieumsetzung und Emissionsentstehung. Die in dieser Arbeit eingesetzten turbulenzgesteuerten Brennratenmodelle (vgl. Kapitel 3) benötigen als Eingangsgröße zur richtigen Berechnung der turbulenten Reaktionsgeschwindigkeit eine Einspritzrate, um die Teilprozesse der Dieselerverbrennung von Einspritzbeginn bis Brennende korrekt abbilden zu können. Abbildung 5-1 zeigt die unterschiedlichen Phasen der Dieselerverbrennung nach [43][50] zu einem zeitlich vorgegeben Einspritzverlauf.

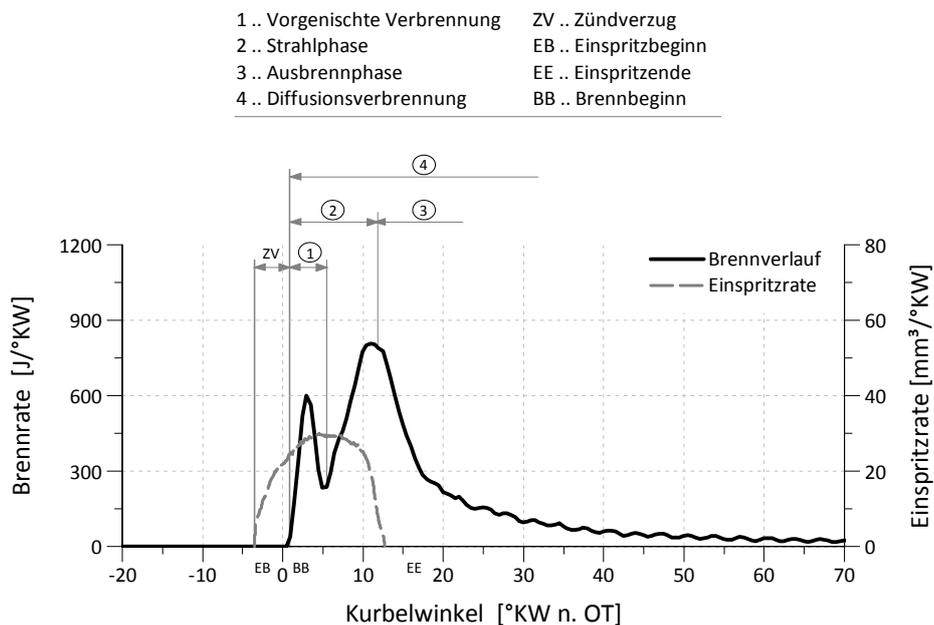


Abbildung 5-1: Phasen des Verbrennungsablaufs am Dieselmotor

Wie aus Abbildung 5-1 ersichtlich, startet die Verbrennung nach Überwinden der Zündverzugszeit. Die fein zerstäubten Kraftstofftröpfchen mischen sich mit Luft, die Verbrennung setzt nach einer Verweilzeit ein. Bei der anschließend auftretenden vorgemischten Verbrennung, welche durch lange Zündverzüge auftritt, findet eine reaktionskinetisch kontrollierte Umsetzung des Gemisches statt. In der zweiten Phase der Verbrennung beginnt die Diffusionsverbrennung, welche über die auftretende Turbulenz im Brennraum gesteuert wird. Hierbei wird ständig Kraftstoff in die bereits brennende Flamme eingespritzt, was zu örtlich stark inhomogenen Gemischverteilungen und Temperaturen im Brennraum führt. Die dritte Phase der Verbrennung charakterisiert die sogenannte Ausbrennphase, die aufgrund von Luftmangel und fallender Temperatur in erster Linie wieder reaktionskinetisch kontrolliert ist [20].

Einen für die Verbrennungsentwicklung bei Großdieselmotoren zusätzlich wichtigen Faktor stellt die Nacheinspritzung im Anschluss an eine Haupteinspritzung dar. Die Nacheinspritzung hat sich als ein wirksames Instrument zur Reduktion der Partikelemissionen bei Groß- und Nutzfahrzeugmotoren erwiesen [11][12][51][52]. Abbildung 5-2 zeigt einen typischen Einspritzverlauf eines Großdieselmotors für einen Vollastbetriebspunkt mit Nacheinspritzung.

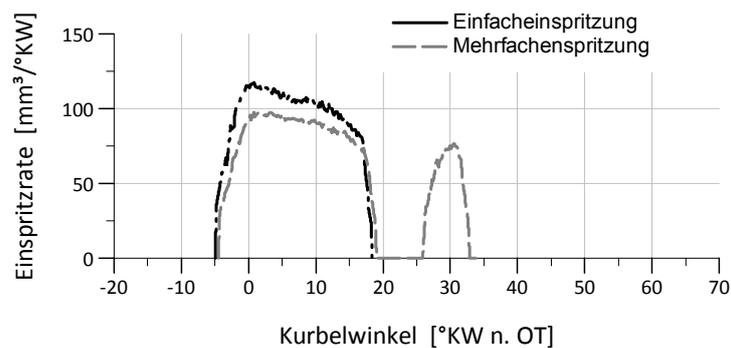


Abbildung 5-2: Einspritzrate eines Großmotors mit Haupt- und Nacheinspritzung

Der zeitliche Abstand der Nacheinspritzung ist aus Emissionsgründen in kurzem Abstand zur Haupteinspritzung positioniert. Auch für etwaige Abgasnachbehandlungsstrategien spielt der Einspritzverlauf eine entscheidende Rolle. Um etwa die Regeneration eines Partikelfilters zu beschleunigen [53], kann durch eine sehr spät gewählte Nacheinspritzung kurzfristig die Abgastemperatur erhöht werden. Voreinspritzungen werden eingesetzt, um Geräusch und Stickoxidbildung bei DI-Dieselmotoren zu senken [59].

Auch die unterschiedlichen Methoden zur Ermittlung der Einspritzrate sind für die Ergebnisqualität der Simulation von hoher Wichtigkeit. Die Literatur beschreibt verschiedene Verfahren und Systeme zur Bestimmung der Einspritzrate. Zwei häufig eingesetzte Methoden werden im nächsten Kapitel vorgestellt.

## 5.2 Methoden zur Bestimmung der Einspritzrate

Zur Bestimmung des Einspritzratenverlaufs (ROI = Rate of Injection) stehen verschiedene aufwendige Methoden zur Verfügung, die sich hinsichtlich Methodik und Genauigkeit unterscheiden. In diesem Abschnitt wird die Methode der Einspritzratenbestimmung nach Bernoulli mithilfe des Nadelhubsignals und eine direkte Messung mittels der Strahlkraftmethode vorgestellt. Die grundlegenden Unterschiede der Messmethoden für die Bestimmung der Einspritzrate und deren Einflüsse auf die Simulation werden anhand von Beispielen und mittels einer Sensitivitätsanalyse gezeigt.

### 5.2.1 Indirekte Methoden zur Bestimmung der Einspritzrate

Eine Möglichkeit zur Bestimmung der Einspritzrate stellt die Messung des kurbelwinkelabhängigen Nadelhubverlaufs am Motor und deren Berechnung aus der verlustlosen Bernoulli Gleichung dar (vgl. Gleichung (5-1)). Eine direkte Messung der Einspritzrate bzw. des Düsendurchflusses am gefeuerten Motor ist nicht durchführbar.

$$\rho \frac{w^2}{2} + p = \text{const.} \quad (5-1)$$

Die Anwendung der Methode erfordert die aus stationären Durchströmversuchen ermittelten Zusammenhänge zwischen Nadelhubverlauf und Düsendurchfluss bzw. effektiver Düsenquerschnittsfläche  $\mu A$ . Diese Kennwerte werden vom Injektorhersteller mit einem Prüföl der Dichte  $\rho_k$  bei einem Einspritzdruck  $p_{mess}$  von 100 bar gemessen. Abbildung 5-3 zeigt den Zusammenhang zwischen Düsennadelhub und Durchfluss für eine Großmotorendüse mit 0.415 mm Spritzlochdurchmesser.

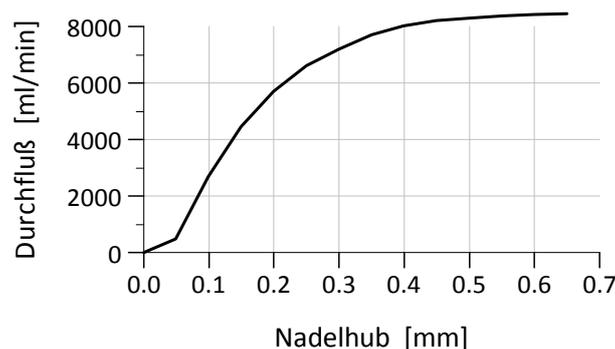


Abbildung 5-3: Durchfluss in Abhängigkeit vom Nadelhub

Nach Messung des kurbelwinkelabhängigen Nadelhubverlaufs kann auf die effektive Düsenquerschnittsfläche  $\mu A$  durch Umstellen von Gleichung (5-2) mit Hilfe des gemessenen Volumenstroms  $V_k$  (vgl. Abbildung 5-3) in Abhängigkeit vom Nadelhub rückgeschlossen werden. Die Berechnung des tatsächlichen Kraftstoff-Volumenstroms bzw. der Einspritzrate erfolgt mit Hilfe des am Injektor anstehenden Leitungsdrucks  $p_{LE}$  und der Kraftstoffdichte  $\rho_k$  nach Gleichung (5-2). Hierzu wird durch Ansetzen der Kontinuitätsgleichung und Umformung der Bernoulli-Gleichung der Kraftstoff-Volumenstrom berechnet.

$$\dot{V}_K = \mu A \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot (p_{LE} - p_0)}{\rho_K}} \quad (5-2)$$

Da der Druck im Düseninneren bzw. Düsenvorraum nicht gemessen werden kann, wird eine Druckmessstelle verwendet, welche möglichst nahe an der Düse positioniert ist. Für die Berechnung der Druckdifferenz wird der Leitungsdruck als Basis herangezogen und der Gegendruck vernachlässigt, da angenommen wird, dass der Arbeitsbereich der Düse im überkritischen Bereich liegt.

Für die Messung des Nadelhubverlaufs selbst ist allerdings ein zusätzlicher Hardware-Aufwand beim Injektor in Kauf zu nehmen. Dadurch können die Flanken des Nadelhubverlaufs berücksichtigt werden. Eine einfache und kostenlose Möglichkeit wäre auf Basis einer passenden Interpretation des Ansteuersignals für das Injektorventil gegeben. Leider scheint aufgrund der Verzögerungseffekte - bedingt durch die Massenträgheit des Ansteuersystems für die Düsennadel - kein leicht beschreibbarer Zusammenhang zwischen Ansteuerbeginn und tatsächlichem Spritzbeginn auf [58]. Noch weiter auseinander liegen Ansteuerende und Spritzende (vgl. Abbildung 5-4). Damit ist eine genaue Aussage über den Einspritzratenverlauf durch das Stromsignal nicht möglich. Zusammen mit dem am Motor gemessenen Nadelhub- und Einspritzdruck, dargestellt in Abbildung 5-4, kann die Einspritzrate entsprechend Gleichung (5-2) bestimmt werden.

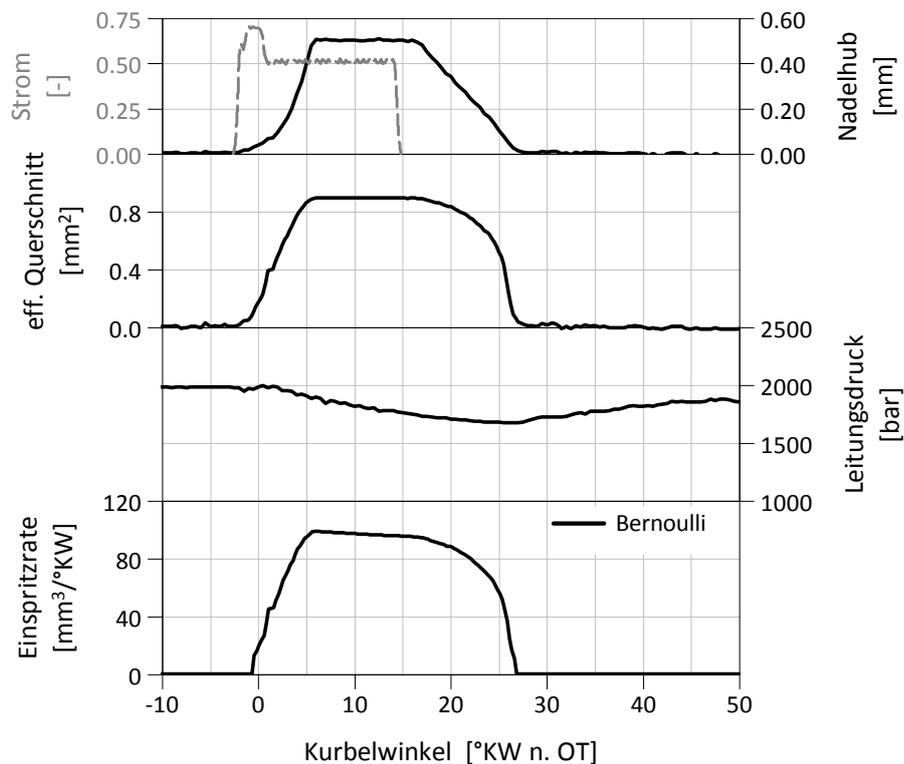


Abbildung 5-4: Berechnete Einspritzrate aus gemessenen Nadelhubverlauf

Charakteristisch ist auch der durch das Öffnen der Düsennadel hervorgerufene Leitungsdruckabfall. Der Druckabfall kann zu Schwingungen im Einspritzsystem führen und wirkt sich auch auf die Berechnung des Einspritzratenverlaufs aus. Durch kürzere Leitungslängen zwischen Hochdruckspeicher und Injektor bzw. einer näheren Anordnung des Hochdruckspeichers beim Zylinderkopf sind Verbesserungen möglich [53].

### 5.2.2 Direkte Methode zur Bestimmung der Einspritzrate

Eine Methode zur direkten Bestimmung der Einspritzrate außerhalb des Motors an speziell adaptierten Prüfständen stellt die Messung der Kraft dar, die ein einzelner Einspritzstrahl auf eine mit einem Druck- bzw. Kraftsensor bestückte senkrecht zur Strahlrichtung angeordnete Prallplatte ausübt. Die Einspritzung des Dieselkraftstoffs erfolgt in eine Kammer mit Stickstoffatmosphäre und einstellbarem Gegendruck. Der Vorteil dieser Methode liegt in der einfachen simultanen Bestimmung von Einspritzrate und Spritzlochaustrittsgeschwindigkeit im Vergleich zu anderen Messverfahren [55]. Als weiterer positiver Effekt der Messmethode gilt die Überprüfbarkeit des Langzeitverhaltens von Einspritzdüsen sowie deren Kavitationsverhalten [55].

In Abbildung 5-5 ist das Spritzloch (1) der Einspritzdüse (2) dargestellt, aus dem der Kraftstoffstrahl (3) sich in Richtung des Kraftsensors (4) mit dessen Messebene (5) bewegt, um 90° umgelenkt wird, und sich dann in radialer Richtung parallel zur Messebene ausbreitet.

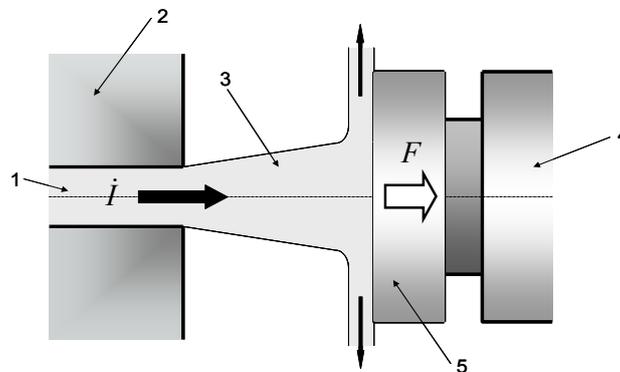


Abbildung 5-5: Prinzip der Strahlkraftmeseinrichtung

Aus Gleichung (5-3) ist ersichtlich, dass die gemessene Strahlkraft gleich dem Impulsfluss ist, der sich als Massenstrom mal Geschwindigkeit ausdrücken lässt.

$$\dot{I} = \dot{m}_K \cdot u_{eff} = A_0 \cdot \rho_K \cdot u_{eff}^2 \equiv F \quad (5-3)$$

Der zeitlich veränderliche Kraftstoff-Volumenstrom berechnet sich aus der Düsenaustrittsfläche mal der Austrittsgeschwindigkeit  $u_{eff}$ . Nach Umformung von Gleichung (5-3) und Einsetzen in Gleichung (5-4) kann daraus die Einspritzrate berechnet werden.

$$\dot{V}_K = A \cdot u_{eff} = \sqrt{\frac{A_0}{\rho_K}} \cdot \sqrt{\dot{I}} \quad (5-4)$$

Für die Berechnung der Einspritzrate aus Gleichung (5-4) ist die Kenntnis der geometrischen Austrittsfläche  $A_0$  der Düse und der mittleren Kraftstoffdichte  $\rho_K$  am Austritt erforderlich. Der Impulsfluss ist laut Gleichung (5-3) proportional zur gemessenen Kraft und Ergebnis der Messung. Einzige Unbekannte bleibt die mittlere Kraftstoffdichte  $\rho_K$ . Die unbekannte mittlere Kraftstoffdichte  $\rho_K$  kann jedoch leicht nach folgenden Überlegungen und Zusammenhängen berechnet werden. Aus Integration von Gleichung (5-4) folgt Gleichung (5-5):

$$\int_{t_1}^{t_2} ROI \cdot dt = V_K = \frac{m_K}{\rho_K} = \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{\dot{I}} \cdot dt \sqrt{\frac{A_0}{\rho_K}} \quad (5-5)$$

Gleichung (5-5) lässt erkennen, dass die mittlere Dichte  $\rho_K$  aus der gemessenen Einspritzmenge  $m_k$  pro Zyklus und dem Integral des Impulsflusses nach der Zeit und der effektiven Düsenquerschnittsfläche berechnet werden kann. Nach Umformung von Gleichung (5-5) erhält man die mittlere Kraftstoffdichte  $\rho_K$  nach Gleichung (5-6).

$$\rho_K = \left( \frac{m_K}{\int_{t_1}^{t_2} \sqrt{\dot{I}} \cdot dt} \right)^2 \cdot \frac{1}{A_0} \quad (5-6)$$

Nach Einsetzen von Gleichung (5-6) in Gleichung (5-4) kann schließlich die endgültige Formulierung für die Berechnung der Einspritzrate bzw. des Kraftstoff-Volumenstroms nach Gleichung (5-7) geschrieben werden. Die ermittelte Einspritzrate ist proportional zur Quadratwurzel des Impulsflusses.

$$\dot{V}_K = \frac{A_0}{m_K} \cdot \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{\dot{I}} \cdot dt \cdot \sqrt{\dot{I}} \quad (5-7)$$

Da das Strahlimpulsmessverfahren eine nahezu lineare Abhängigkeit von der Druckdifferenz aufweist, ist es sowohl für kavitierende als auch nicht kavitierende Düsenbetriebspunkte verwendbar [57]. Abbildung 5-6 zeigt die ermittelte Einspritzrate ausgehend vom kurbelabhängigen Strahlkraftverlauf.

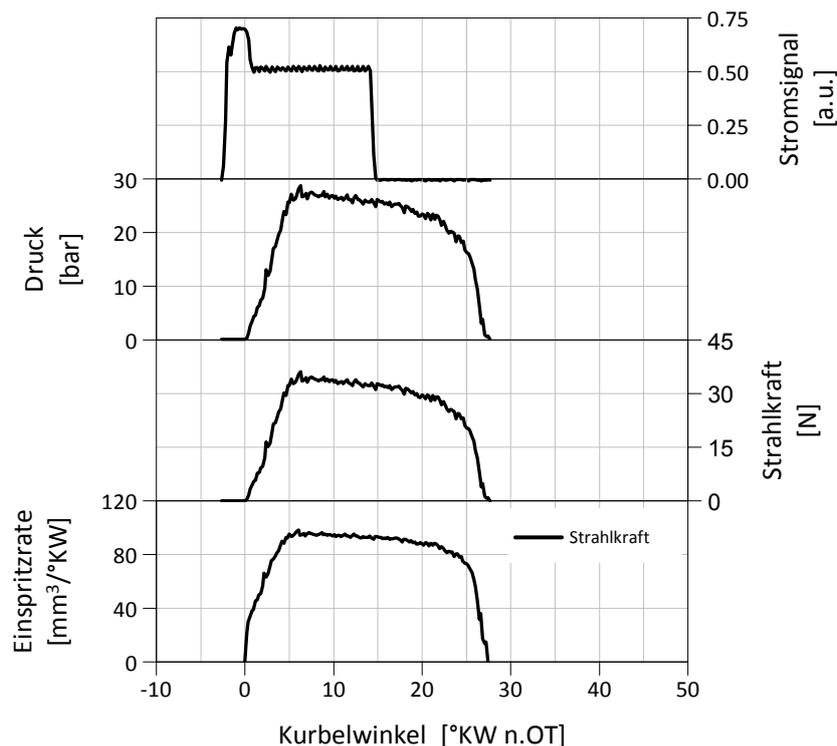


Abbildung 5-6: Ermittelte Einspritzrate aus der Strahlimpulsmessung

Durch die Berücksichtigung der Kavitation im Messverfahren steigt die theoretische Düsenaustrittsgeschwindigkeit an. Es bildet sich eine Zweiphasenströmung [56]. Da die Dampfblasen im Düsenloch implodieren, wird dem Einspritzstrahl zusätzliche turbulente kinetische Energie zugeführt. Die erforderliche Korrektur der Einspritzmenge für Fälle mit und ohne Kavitation bei variablen Brennraumgedrücken kann mit der Strahlimpulsmethode durchgeführt werden, indem in Gleichung (5-7) ein Korrekturterm berücksichtigt wird [55]. Mehr Informationen über das Thema Düsenkavitation und das Strahlkraftverfahren findet sich unter [55][57].

Aufgrund des aufwändigen Messverfahrens stellt die Strahlkraftmessung eine genaue Methode zur Ermittlung der Einspritzrate dar. Abbildung 5-7 zeigt einen abschließenden Vergleich der Einspritzraten aus Stromsignal, Nadelhubverlauf und Strahlkraftverfahren.

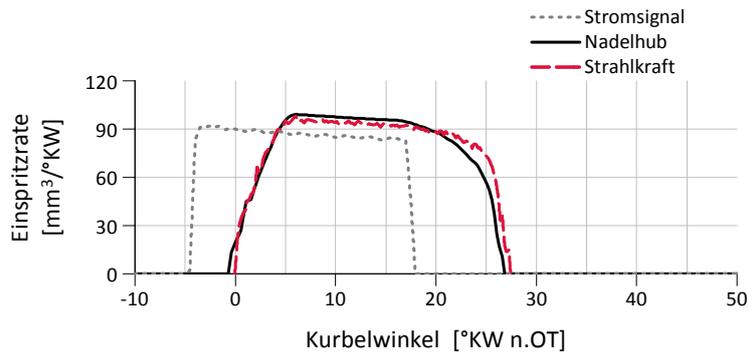


Abbildung 5-7: Einspritzrate aus Stromsignal, Nadelhub und Strahlkraftmessung

Es fällt auf, dass die Bernoulli Einspritzrate Unterschiede in den Flanken und im Durchfluss im Vergleich zur Strahlkrafteinspritzrate aufweist. Mit dem gemessenen Stromsignal kann jedoch keine eindeutige Zuordnung für Spritzbeginn und Flankenform gefunden werden (vgl. Abbildung 5-7). Das Stromsignal eignet sich daher nicht zur Berechnung der Einspritzrate. Aus diesem Grund wurden für die in dem Kapitel durchgeführten simulatorischen Vergleiche Einspritzraten aus Nadelhubverlauf und Strahlkraftverfahren eingesetzt.

### 5.3 Brennratensimulation mit gemessener und gerechneter Einspritzrate

Die Einspritzratenbestimmung aus Nadelhubverlauf und Strahlkraftmethode zieht Divergenzen hinsichtlich Messprinzip und Genauigkeitsanforderungen nach sich. In diesem Abschnitt werden anhand von unterschiedlichen 0D- und 3D-CFD-Verbrennungsmodellen die Auswirkungen auf Verbrennung und Schadstoffbildung diskutiert. Hierzu wurden für ausgewählte Motorbetriebspunkte die resultierenden Unterschiede für Brennverlauf, Mitteldruck, Energieumsatz, Stickoxid- und Russbildung an kalibrierten Simulationsmodellen untersucht und bewertet.

- Volllast

Für den Volllastpunkt wurden Einspritzraten unter Zugrundelegung der Strahlkraftmethode und der Messung von Einspritzdruck, Nadelhub und Düsenströmungsmessung verwendet. Abbildung 5-8 zeigt einen Vergleich der Einspritz- und Brennraten für einen Volllastpunkt mit 24 bar indiziertem Mitteldruck und 1400 bar Einspritzdruck. Die Kraftstoffmasse in der Simulation entspricht dabei der Messung am Motorprüfstand. Als Verbrennungsmodelle kamen das nulldimensionale DCM und das reaktionskinetische ECFM-3Z Modell zum Einsatz.

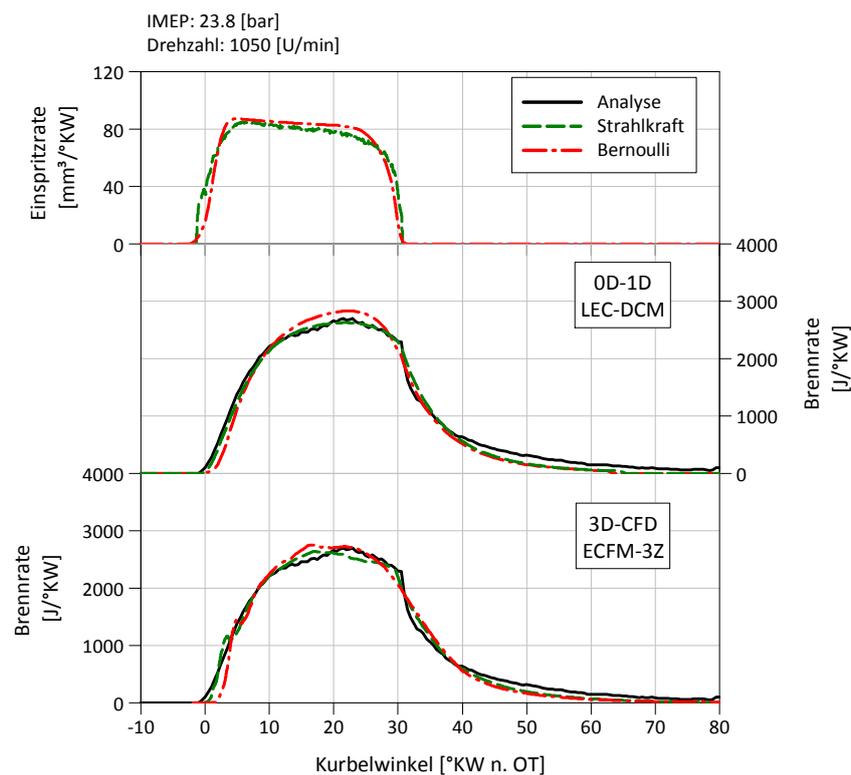


Abbildung 5-8: Vergleich von Einspritzrate und Verbrennung für Volllast

Der Vergleich der Einspritzraten zeigt, dass trotz der wesentlich aufwendigeren Strahlkraftmessung, nur geringe Abweichungen in der Steigung der Öffnungsflanke bzw. ein gering versetzter Einspritzbeginn bei der Bernoulli Einspritzrate zu sehen ist. Jedoch treten Unterschiede im maximalen Durchfluss bzw. im Absolutniveau der Bernoulli Einspritzrate auf. Beide Einspritzraten weisen aber gleiches Einspritzende und eine nahezu identische Schließflanke auf.

Die beschriebenen Unterschiede in der Einspritzrate wirken sich auch auf die Verbrennungssimulation aus. Aufgrund der Divergenzen in der Öffnungsflanke der Bernoulli-Einspritzrate hat sowohl das DCM- als auch das ECFM-3Z Modell einen späteren Brennbeginn in der Simulation. Die Unterschiede im Durchfluss führen bei DCM zu einer markanten Überhöhung des Brennverlaufs, beim ECFM-3Z Modell ist diese Überhöhung wesentlich geringer ausgeprägt. Der Einfluss der Schließflanken beider Einspritzraten auf die Verbrennung ist für beide Verbrennungsmodelle vernachlässigbar. Die Ausbrennphase wird von beiden Verbrennungsmodellen nahezu identisch abgebildet.

Abbildung 5-9 zeigt im Vergleich zur Messung die Ergebnisse der unterschiedlichen Einspritzverläufe auf die 0D-1D und 3D-CFD Simulation für indizierten Mitteldruck, Umsatzrate, Stickoxid und Russ. Zur Abbildung der Emissionen wurde für Stickoxid das erweiterte Zeldovich-Modell, für die Berechnung von Russ das *Lund-* [89] und *Frolov-* *Modell* [60] eingesetzt.

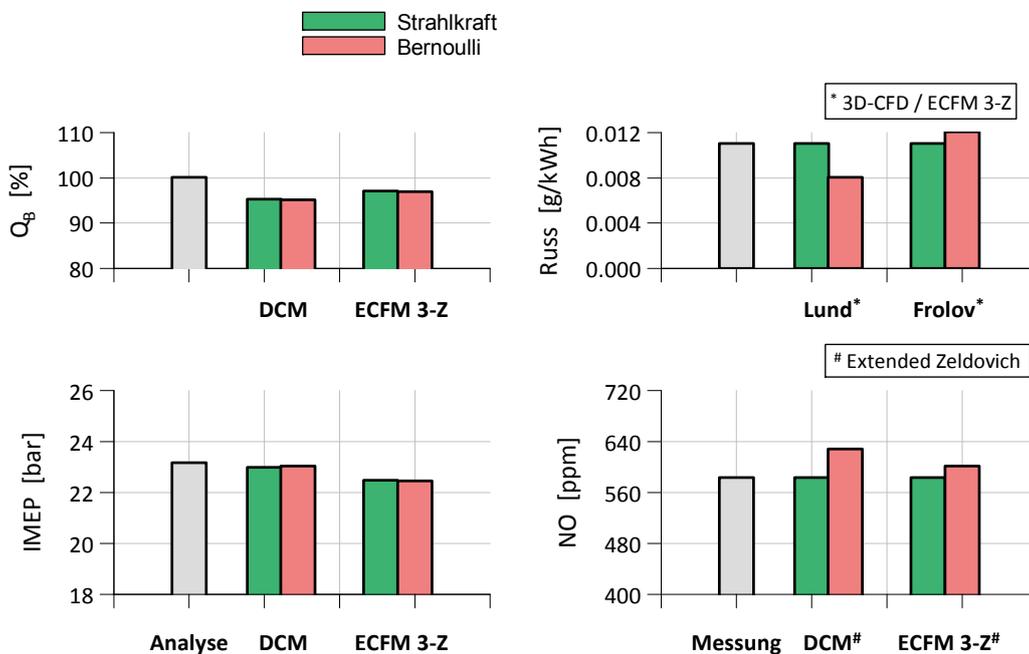


Abbildung 5-9: Auswirkungen der Einspritzrate auf IMEP,  $Q_B$  und Emissionen bei Vollast

Es fällt auf, dass bei gleicher eingespritzter Kraftstoffmenge das DCM-Modell einen Energieumsatz von nur 95% im Vergleich zur Analyse erreicht. Das ECFM-3Z Modell jedoch 98% umsetzt. Die Einspritzrate hat auf den Energieumsatz für beide Simulationsmodelle einen nahezu vernachlässigbaren Einfluss. Der indizierte Mitteldruck liegt im Fall des DCM-Modells sehr nahe am Ergebnis der Analyse, die 3D-CFD Simulation hingegen etwas darunter. Diese Abweichungen sind auf Unterschiede in den Wärmeübergangsmodellen oder Ungenauigkeiten in der Analyse des Arbeitsprozesses z.B. Druckaufnehmer zurückzuführen [84].

Gravierender wirkt sich der Einfluss der Einspritzrate auf die NO<sub>x</sub>-Emissionen aus. Hier zeigt die Bernoulli Einspritzrate eine stark erhöhte NO<sub>x</sub>-Bildung - sowohl für die 0D-1D als auch für die 3D-CFD Rechnung. Schuld ist die erhöhte Verbrennungstemperatur, welche sich durch die Unterschiede im Brennverlauf mit der Bernoulli Einspritzrate ergibt.

- Teillast

Eine Untersuchung der Einflüsse der Einspritzraten aus Bernoulli und Strahlkraft für einen Teillastpunkt soll klären, ob mit größeren Auswirkungen als im Volllastfall zu rechnen ist. Der untersuchte Betriebspunkt in diesem Fall repräsentiert einen unteren Teillastpunkt einer Lokomotive mit 10 bar indiziertem Mitteldruck und 888 U/min Motordrehzahl. Der Einspritzdruck betrug 1600 bar.

In Abbildung 5-10 ist ein Vergleich der Einspritzraten aus Bernoulli und Strahlkraftmessung sowie die resultierenden Auswirkungen auf die Verbrennung dargestellt. Als Verbrennungsmodelle wurde wiederum das nulldimensionale DCM und das reaktionskinetische ECFM-3Z Modell eingesetzt.

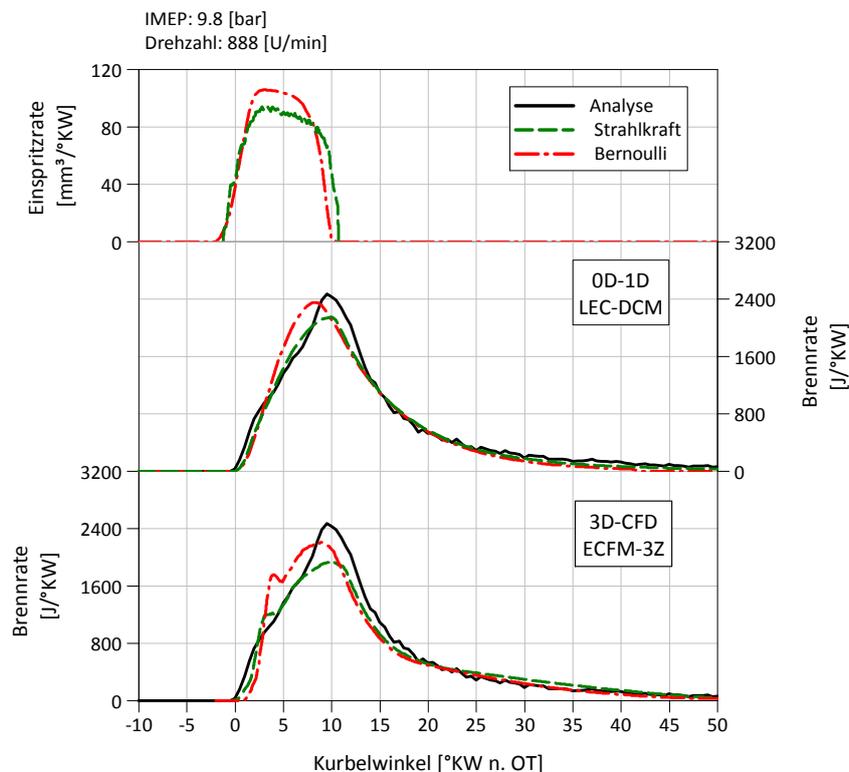


Abbildung 5-10: Vergleich von Einspritzrate und Verbrennung für Teillast

Aus der Abbildung sind deutliche Unterschiede zwischen Bernoulli und Strahlkraft-einspritzrate abzulesen. Die Auswirkungen der Einspritzratenbestimmung in der Teillast sind ein früheres Einspritzende und ein deutlicher Unterschied im Absolutniveau für die Bernoulli-Einspritzrate. Die Form der Öffnungs- und Schließflanken ist annähernd identisch.

Die resultierenden Unterschiede der Bernoulli Einspritzrate sind vermutlich auf Kalibrierungsungenauigkeiten des Sensors zur Aufzeichnung des Nadelhubsignals zurückzuführen. Auch die Tatsache, dass zwischen der Betätigung des Magnetventils und dem Öffnen der Düsenadel eine zeitliche Verzögerung auftritt, kann zu Verfälschungen des Nadelhubverlaufs führen [58]. Generell muss aber festgestellt werden, dass die Einspritzratenermittlung aus dem Nadelhubverlauf mit Unsicherheiten verbunden ist. Deshalb ist vor allem für die Teillast mit Abstrichen in der Prognosefähigkeit der Verbrennungssimulation zu rechnen.

Wie aus Abbildung 5-10 hervorgeht, zeigen die unterschiedlichen Einspritzraten sowohl für DCM als auch ECFM-3Z deutliche Einflüsse auf die Simulation der Brennrate. Beim DCM-Modell sind Unterschiede hinsichtlich Brennbeginn und Schwerpunktlage feststellbar. Noch markantere Auswirkungen auf die Simulation der Brennrate veranschaulicht das ECFM-3Z Modell. Hier tritt nicht nur ein späterer Brennbeginn, sondern auch ein erhöhter Vormischanteil, eine frühere Schwerpunktlage und ein erhöhtes Absolutniveau der Brennrate auf. Der Einfluss der Einspritzraten auf die Ausbrennphase wird von beiden Verbrennungsmodellen nahezu identischen abgebildet.

Abbildung 5-11 konkretisiert für den Teillastpunkt die durch die Einspritzverläufe resultierenden Unterschiede für indiziertem Mitteldruck, Umsatzrate, Stickoxid und Russ. Zur Abbildung der Emissionen wurden abermals dieselben Modelle wie für den Volllastpunkt eingesetzt.

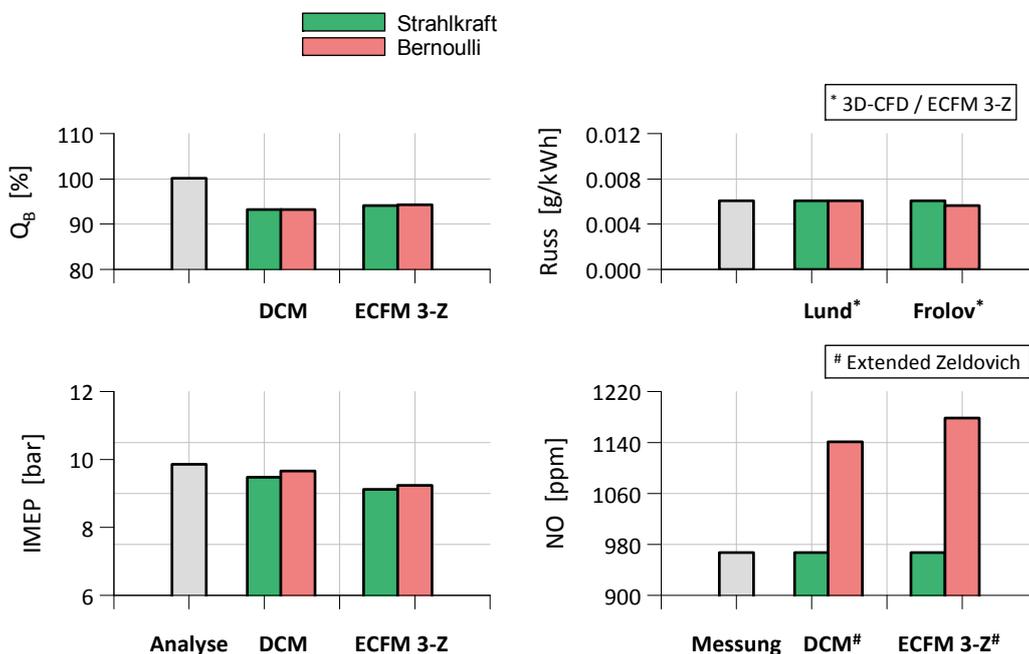


Abbildung 5-11: Auswirkungen der Einspritzrate auf IMEP,  $Q_B$  und Emissionen bei Teillast

Wie bei der Volllast zeigt sich auch für die Teillast in der Simulation keine 100%ige Umsetzung der eingebrachten Kraftstoffenergie im Vergleich zur Analyse. Der Energieumsatz liegt im Fall des DCM-Modells sogar unter dem Wert der Volllast, jener des ECFM-3Z Modells etwas höher. Hinsichtlich des Mitteldrucks kann kein großer Einfluss der Einspritzrate festgestellt werden.

Ein gravierender Einfluss der Einspritzrate tritt jedoch in der Prognose für Stickoxid auf. Aufgrund der früheren Schwerpunktlage und der Unterschiede im Vormischanteil zeigt die Simulation für die Bernoulli-Einspritzrate eine deutliche Abweichung in der Prognose von Stickoxid von mehr als 20%. Die eingesetzten reaktionskinetischen Russmodelle zeigen hingegen keine Reaktion auf die Berechnung von Russ.

- Nacheinspritzung

Zur Beurteilung der Prognosefähigkeit einer Mehrfacheinspritzung, wurden Messungen am Motorprüfstand und Simulationen mit null- und dreidimensionalen Modellen für einen Vollastpunkt mit Nacheinspritzung durchgeführt. Am Motorprüfstand wurde in Versuchen der optimale Abstand zwischen Haupt- und Nacheinspritzung ermittelt. Als weiterer Parameter wurde die optimale Nacheinspritzmenge bestimmt. Die verwendeten Einspritzraten wurden wieder nach dem Strahlkraftprinzip und durch die Messung des Nadelhubs über die Bernoulli Gleichung ermittelt.

Nachfolgende Abbildung 5-12 zeigt Einspritzraten nach Strahlkraft- und Bernoulli-Methode für die Vollast mit 0% und 20% AGR-Rate. Die Einflüsse der Einspritzrate auf die Simulation wurden durch kalibrierte Verbrennungsmodelle bewertet.

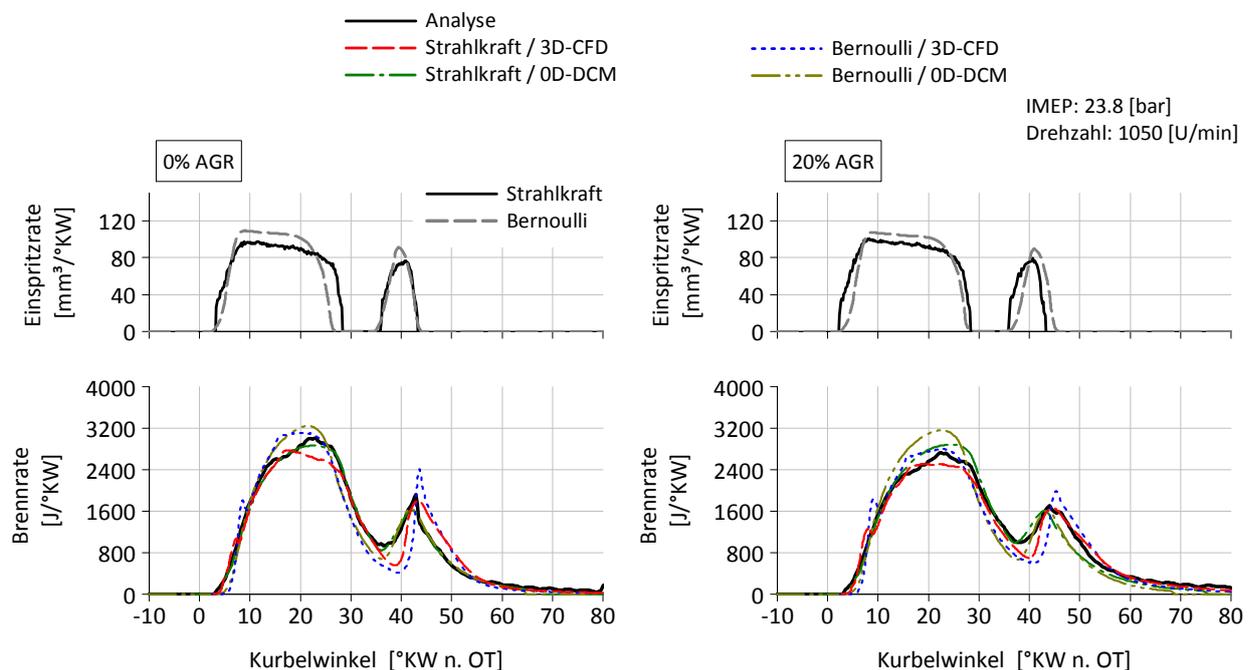


Abbildung 5-12: Vergleich der Einspritzraten mit Nacheinspritzung und Brennraten für einen Vollastpunkt mit und ohne AGR

Im Unterschied zum zuvor beschriebenen Vollastpunkt zeigt die AGR-Variation mit Nacheinspritzung deutliche Unterschiede für Bernoulli- und Strahlkraft-Einspritzrate. Die Bernoulli-Einspritzrate weist beispielsweise für die Haupteinspritzung eine wesentlich kürzere Einspritzzeit und einen gesteigerten Durchfluss im Vergleich zur Strahlkraftmessung auf. Erstaunlich ist jedoch die Übereinstimmung des Verlaufs und die Form der Nacheinspritzung der Bernoulli-Einspritzrate mit der Strahlkraftmessung.

Der Lastpunkt mit 20% AGR und identischer Leistung zeigt ähnliche Unterschiede wie der 0% AGR-Punkt. Allerdings ist ein zeitlicher Versatz des Spritzbeginns für die Haupt- und Nacheinspritzung im Bernoulli Fall offensichtlich. Trotzdem ist auch für diesen Lastfall eine erstaunlich hohe Übereinstimmung für den Verlauf der Nacheinspritzung zu bemerken.

Die Berechnungsergebnisse für die Bernoulli-Einspritzrate verdeutlichen hingegen für beide Verbrennungsmodelle eine frühere Schwerpunktlage und eine veränderte Ausbrennphase. Speziell beim DCM-Modell tritt mit beiden Einspritzraten eine ungenaue Abbildung der Verbrennung auf. Die Wirkung der AGR wird vom Modell nur mangelhaft dargestellt.

Abbildung 5-13 veranschaulicht die resultierenden Unterschiede der Simulation zur Analyse für indizierten Mitteldruck und Wirkungsgrad für die Lastfälle mit und ohne AGR.

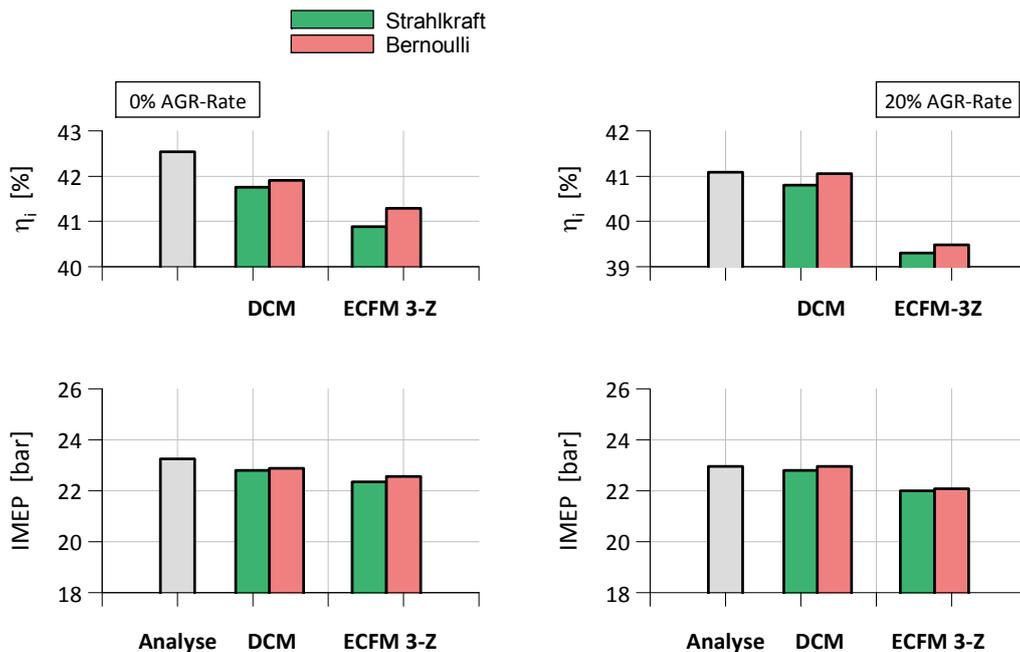


Abbildung 5-13: Einfluss der Einspritzrate auf Wirkungsgrad und Mitteldruck

Aufgrund der auftretenden Unterschiede in den Schwerpunktlagen der Verbrennung erzielt die Simulation für die Bernoulli Einspritzrate einen Wirkungsgradvorteil von 0.2-0.4% gegenüber den Ergebnissen mit der Einspritzrate der Strahlkraft.

Wegen der mangelhaften Abbildung von AGR beim DCM-Modell sind in den Ergebnissen jedoch keine Abweichungen bei Mitteldruck und Wirkungsgrad bemerkbar. Daher sollte beim DCM-Modell eine Korrektur des Einflusses der verdünnten Ladungsmasse auf die Umsetzung von Kraftstoff mit Sauerstoff im Bereich des Einspritzstrahls vorgenommen werden. Das ECFM-3Z Modell bildet hingegen die durch AGR hervorgerufene Ladungsverdünnung korrekt ab, obgleich die Ergebnisse für indizierten Mitteldruck und Wirkungsgrad aufgrund des zu geringen Energieumsatzes unter dem Niveau der Analyse liegen.

Abbildung 5-14 stellt die Ergebnisse der Emissionsberechnung für Stickoxid und Russ für alle Punkte der AGR-Variation dar. Die Berechnung der Emissionen erfolgte für Stickoxid mit dem erweiterten Zeldovich Modell, für Russ wurde das reaktionskinetische Lund-Modell eingesetzt. Für eine genauere Beurteilung der unterschiedlichen Methoden zur Bestimmung der Einspritzrate wurden die Emissionsmodelle auf den 0% AGR-Punkt kalibriert, um die Korrelation der Modelle für eine steigende AGR-Rate beurteilen zu können.

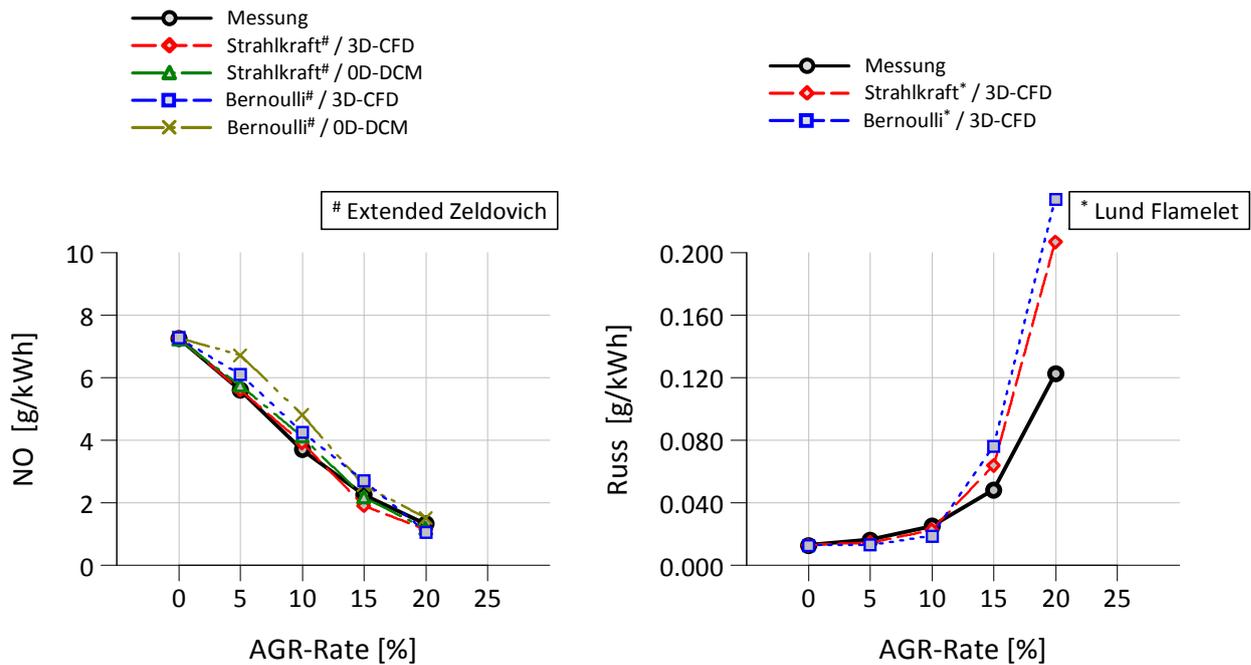


Abbildung 5-14: Auswirkung der Einspritzrate mit Nacheinspritzung auf NO und Russ

Aus den Ergebnissen geht hervor, dass die eingesetzten Einspritzraten zu deutlichen Unterschieden in der Berechnung von Stickoxid führen. Die Simulationsergebnisse der 3D-CFD Rechnung weisen für die Bernoulli-Einspritzrate eine erhöhte Stickoxidkonzentration auf, weichen allerdings nicht so stark von der Messung ab wie die nulldimensionale Simulation. Im Gegensatz dazu kann mit Strahlkräfteinspritzraten aufgrund der besseren Korrelation mit der Verbrennung für Stickoxid sowohl mit null- als auch dreidimensionalen Modellen eine hervorragende Übereinstimmung mit der Messung erreicht werden. Auch die Prognostizierung von Russ birgt für eine Strahlkraft-Einspritzrate ein höheres Potential und liefert zudem eine bessere Übereinstimmung mit der Messung.

- Schlussfolgerungen

Die Bewertung der Simulationsergebnisse für Voll- und Teillast ergab, dass für eine hohe Prognosefähigkeit von Verbrennung und Schadstoffbildung die Form und der Verlauf der Einspritzrate eine tragende Rolle spielt. Ist für die Volllast noch eine geringe Abweichung bei Mitteldruck und Stickoxid zwischen Bernoulli- und Strahlkraft-Einspritzrate feststellbar, so erreicht man für die Teillast hohe Ergebnisqualität für Verbrennung und Stickoxidkonzentration nur mit einer entsprechenden Strahlkräfteinspritzrate. Auch Simulationen für Betriebspunkte mit Mehrfacheinspritzung bestätigten den Vorteil zu Gunsten der Strahlkräfteinspritzrate. Als Nachteil ist jedoch das zeitintensive und aufwendige Messverfahren zur Ermittlung von Strahlkräfteinspritzraten zu sehen.

## 5.4 Sensitivitätsanalyse

Im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse soll der Einfluss von Spritzbeginn, Durchfluss und Flankenform der Einspritzrate auf Energieumsetzung, Verbrauch, Stickoxid- und Russemission untersucht werden. Als zulässige Abweichungen wurde für den Kraftstoffverbrauch  $\pm 1\%$ , für die NO-Emission  $\pm 10\%$  und für die Rußemission  $\pm 20\%$  festgelegt. Unter Zugrundelegung von synthetisch ermittelten Einspritzraten soll die Auswirkung auf die Simulation anhand von kalibrierten Verbrennungs- und Emissionsmodellen bewertet werden.

- Spritzbeginn

Zu Beginn wurde die Sensitivität des Spritzbeginns und dessen Auswirkung auf die Verbrennung und Schadstoffbildung untersucht. Die Ausgangsbasis stellt ein optimal abgestimmter Basispunkt dar, welcher zwecks Anschaulichkeit in den nachfolgenden Abbildungen nicht dargestellt ist. Auf Basis konstanter Einspritzmenge wurde eine Variation des Einspritzbeginns durchgeführt. Abbildung 5-15 zeigt die Simulationsergebnisse für null- und dreidimensionale Modelle im Vergleich zum Basispunkt.

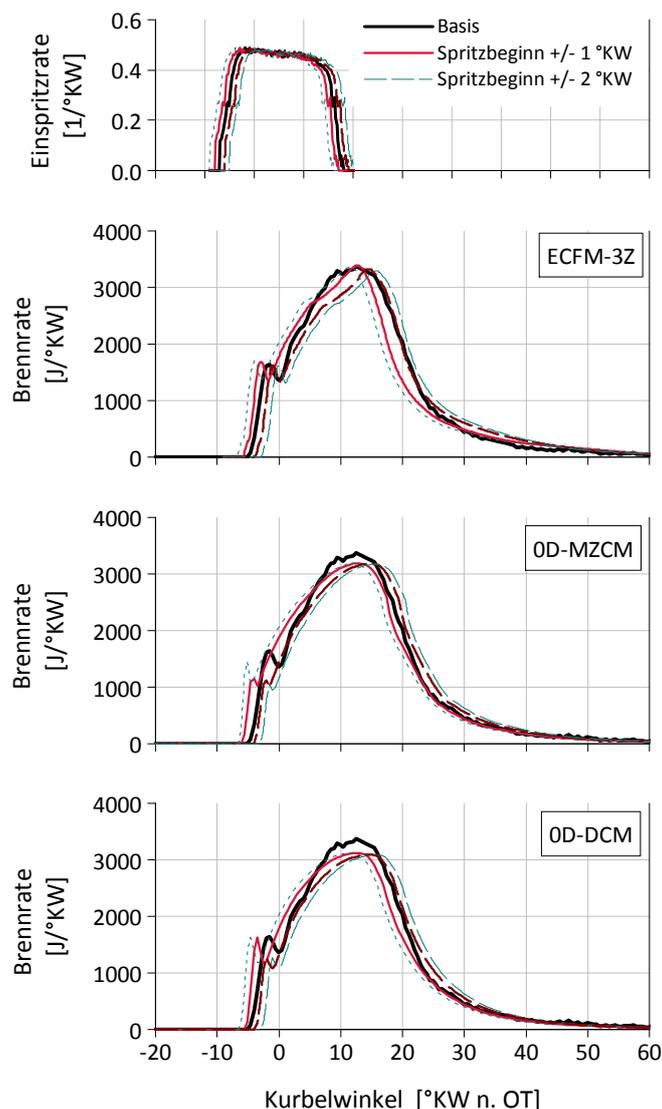


Abbildung 5-15: Sensitivität des Spritzbeginns auf die Simulation der Brennrate

Die Variation des Einspritzbeginns ergibt für das null- und quasidimensionale Modell und die 3D-CFD Rechnung sehr ähnliche Ergebnisse. Die Verschiebung des Einspritzzeitpunktes bewirkt eine geringfügige Änderung im vorgemischten Anteil der Verbrennung und eine Verschiebung der Schwerpunktlage. Am deutlichsten wirkt sich ein Fehler des Einspritzbeginns jedoch in der 3D-CFD Simulation aus. Aufgrund der sehr hohen Sensitivität des ECFM-3Z Verbrennungsmodells auf den Spritzbeginn sind wesentlich größere Abweichungen als bei den null- und quasidimensionalen Modellen sichtbar. Augenscheinliche Abweichungen treten in den Modellen in der Abbildung der vorgemischten Verbrennung auf. Eine geringe Verschiebung des Spritzbeginns nach Spät führt bei den Modellen DCM und MZCM zu einer teilweisen Übereinstimmung der Brennraten, beim ECFM-3Z Modell ist dies jedoch nicht mehr der Fall.

Abbildung 5-16 gibt Aufschluss über Abweichungen für Wirkungsgrad, Kraftstoffverbrauch, NO<sub>x</sub>- und Russ im Vergleich zur Basis. Jene ergeben sich aus der Sensitivitätsanalyse des Spritzbeginns. Als Bewertungsgrundlage für Stickoxid wurde wiederum das erweiterte Zeldovich Modell, für Russ das phänomenologische Modell nach Boulouchos [61] und das reaktionskinetische Lund-Modell eingesetzt. Die Kalibrierung der Emissionsmodelle erfolgte anhand des Basispunkts. Die Abstimmung der Modellparameter des Lund-Modells für Russformation und Oxidation erfolgte nach Standardwerten, die Parameter für das Boulouchos-Modell wurden aus der Arbeit von Gufler [62] übernommen.

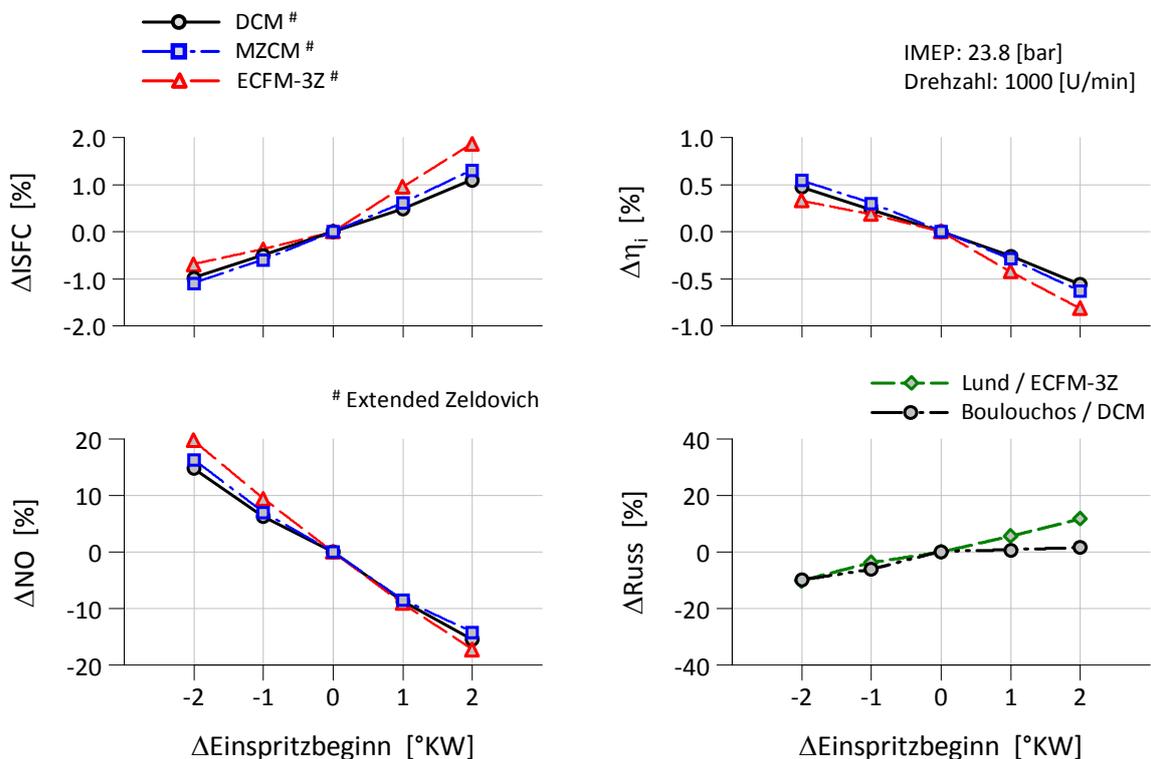


Abbildung 5-16: Einfluss des SOI auf Wirkungsgrad, Verbrauch und Emissionen

Die aus der sich verändernden Schwerpunktlage resultierenden Unterschiede in der Verbrennung ergeben Unterschiede im Kraftstoffverbrauch von -1% bis +2%. Aufgrund der identischen Brennraten bei DCM und MZCM sind teilweise identische Ergebnisse für Verbrauch und Stickoxid erkennbar.

Durch die Sensitivitätsanalyse wird klar, dass ein Unschärfebereich des Spritzbeginns von  $\pm 1^\circ\text{KW}$  die festgelegten Abweichungen für Verbrauch von  $\pm 1\%$  und Stickoxid von  $\pm 10\%$  nicht überschreitet. Die 3D-CFD Ergebnisse erzielen für den vorliegenden Fall bei Russ eine wesentlich höhere Sensitivität auf den Brennbeginn und führen zu Änderungen im Emissionsniveau von  $\pm 20\%$ . Erkennbar ist ebenfalls eine hohe Übereinstimmung des NOx-Russ Trade-Offs zwischen Zeldovich und Lund-Modell und eine geringere Sensitivität des Boulouchos-Modells auf den Einspritzbeginn. Für eine hohe Ergebnisqualität stellt daher die richtige Kenntnis des Einspritzbeginns eine notwendige Voraussetzung zur genauen Berechnung der Emissionen mit der Simulation dar.

- Düsendurchfluss

Eine weitere Unsicherheit für die Bestimmung der Einspritzrate ist die Kenntnis des korrekten Düsendurchflusses. Durch Variation des Düsenlochdurchmessers wurde eine Änderung des nominellen Düsendurchflusses jeweils um  $\pm 5\%$  und  $\pm 10\%$  relativ zum Basiswert simuliert. Auf Basis gleichen Einspritzdrucks und Menge stellen sich für gleichen Spritzbeginn unterschiedliche Einspritzdauern ein. Abbildung 5-17 lässt die auftretenden Unterschiede in der Simulation für Einspritz- und Brennrate erkennen.

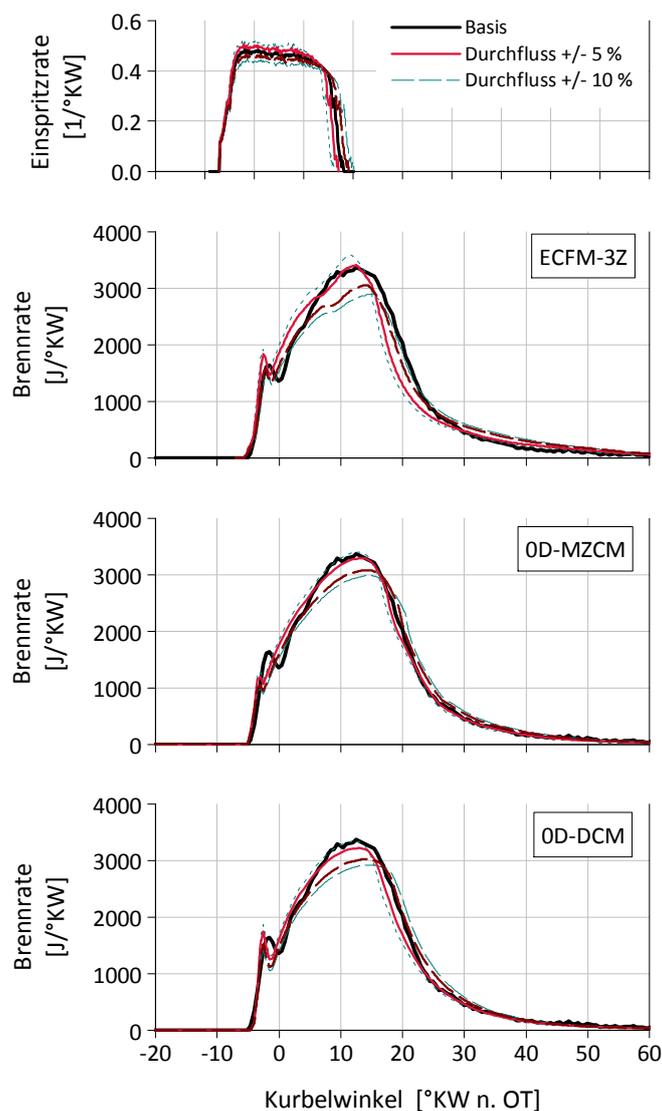


Abbildung 5-17: Sensitivität des Durchflusses auf die Simulation der Brennrate

Die Variation des Düsendurchflusses wird von den Modellen verschieden sensitiv behandelt. Das ECFM-3Z Modell reagiert wesentlich empfindlicher auf Durchflussänderungen als nulldimensionale Modelle. Aufgrund des gleichen Spritzbeginns und der identischen Öffnungsflanke der Einspritzraten sind nur geringe Änderungen im Vormischanteil der Verbrennungen erkennbar. Eine Steigerung des Düsendurchflusses führt bei DCM und MZCM zu einer optisch noch akzeptablen Übereinstimmung der Brennraten mit der Basis. Trotzdem treten Unterschiede im Wirkungsgrad und Emissionsniveau auf.

Abbildung 5-18 veranschaulicht die Ergebnisse für Verbrauch,  $\text{NO}_x$ - und Russemission der Düsendurchflussvariation. Die Modellparameter der Emissionsmodelle sind mit jenen der zuvor beschriebenen Sensitivitätsanalyse des Spritzbeginns identisch.

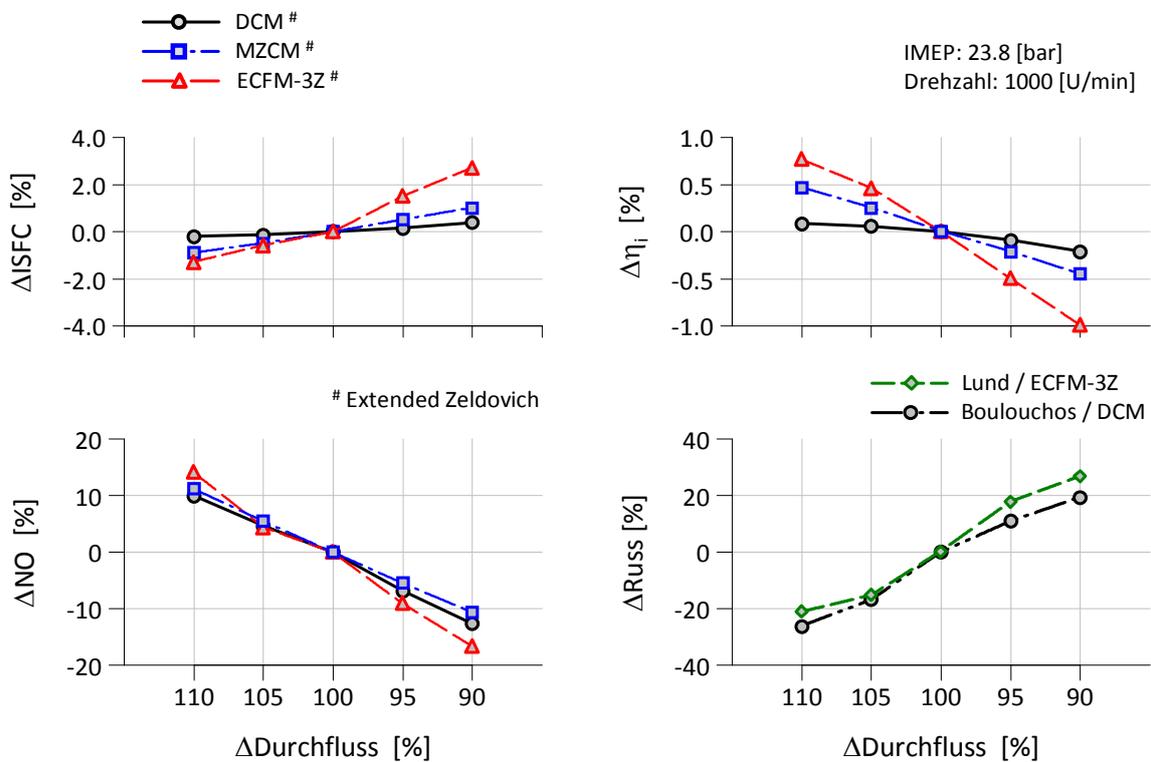


Abbildung 5-18: Einfluss des Durchflusses auf Wirkungsgrad, Verbrauch und Emissionen

Die Simulationsergebnisse der null- und quasidimensionalen Modelle ergeben für eine Durchflussänderung von  $\pm 10\%$  eine zulässige Abweichung für Verbrauch, Stickoxid und Russ unter den festgelegten Grenzwert. Die Sensitivität des ECFM-3Z Modells gestaltet sich hingegen für die Durchflussvariation bedeutend höher und führt teilweise zu einer Überschreitung der festgelegten Grenzwerte.

Die eingesetzten Russemissionsmodelle liefern für höhere Durchflüsse einheitlich eine Emissionsreduktion in der Größenordnung von 20% und zeigen in Richtung geringerer Durchflussraten eine ähnliche Tendenz. Eine exakte Prognose von Verbrennung aber auch Schadstoffbildung setzt daher eine korrekte Angabe des Düsendurchflusses voraus.

- Öffnungsflanke

Entscheidend für eine hohe Ergebnisqualität der Simulation sind die Flanken des Einspritzverlaufs. Auf Basis synthetisch zugrunde gelegter Einspritzraten wurden Variationen für die Öffnungsflanke der Einspritzrate durchgeführt und Auswirkungen mit der Simulation beurteilt. Die Generierung der Einspritzverläufe erfolgte unter den Randbedingungen identischer Kraftstoffmasse, unverändertem Einspritzdruck und gleicher Düsengeometrie. Als zusätzliches Kriterium wurden identische Schließflanken und gleiche Schwerpunktlagen der Brennraten für die Simulation vorausgesetzt.

Abbildung 5-19 legt die Extremfälle der Einspritzraten mit langsam und sehr schnell öffnender Flanke im Vergleich zum Basis Einspritzverlauf dar. Aufgrund der Ähnlichkeit der Brennraten und der auftretenden Analogie sind nur die Ergebnisse des DCM- und des ECFM-3Z dokumentiert.

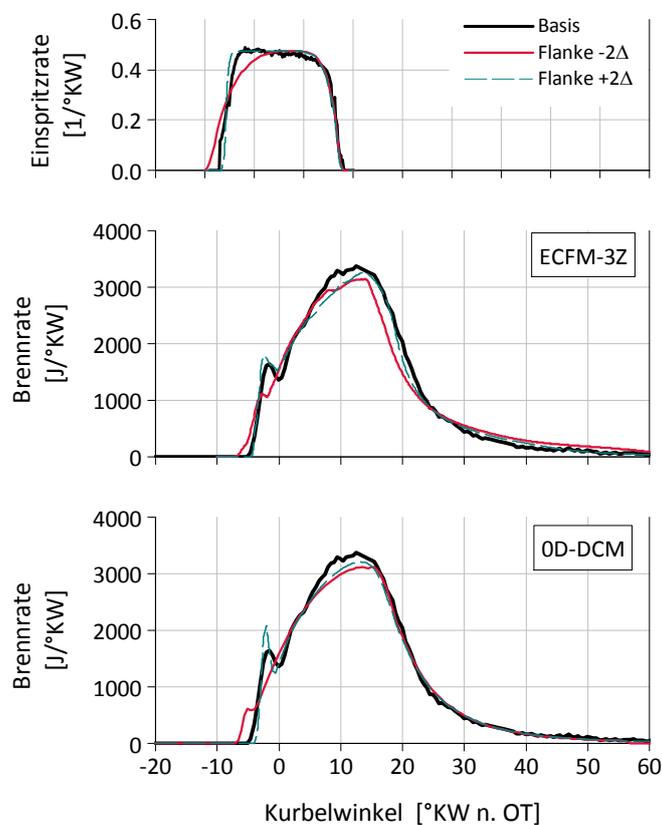


Abbildung 5-19: Sensitivität der Öffnungsflanke auf die Simulation der Brennrate

Wie Abbildung 5-19 entnommen werden kann, beinhaltet die Simulation für die Variation der Öffnungsflanke doch deutliche Unterschiede bei Vormischanteil und Brennbeginn. Die durch die flachere Öffnungsflanke hervorgerufene Verringerung der Einspritzmenge während des Zündverzugs hat sowohl für das DCM als auch ECFM-3Z Modell kleinere Vormischanteile zur Folge. Steilere Öffnungsflanken bewirken hingegen größere Vormischanteile und etwas spätere Brennbeginne. Wegen der konstant gehaltenen Schwerpunktlage ergeben sich nur geringe Unterschiede in der Ausbrennphase. Allerdings sei festgehalten, dass im Gegensatz zur flachen Flanke eine steile Öffnungsflanke eine hochwertigere Übereinstimmung mit dem Basispunkt erreicht.

Abweichungen im Brennverlauf lassen auch Änderungen in der Emissionsberechnung erwarten. Die Ergebnisse in Abbildung 5-20 verdeutlichen für den Einfluss der Öffnungsflanke Unterschiede in den  $\text{NO}_x$ -Emissionen von bis zu 10% im Vergleich zur Basis.

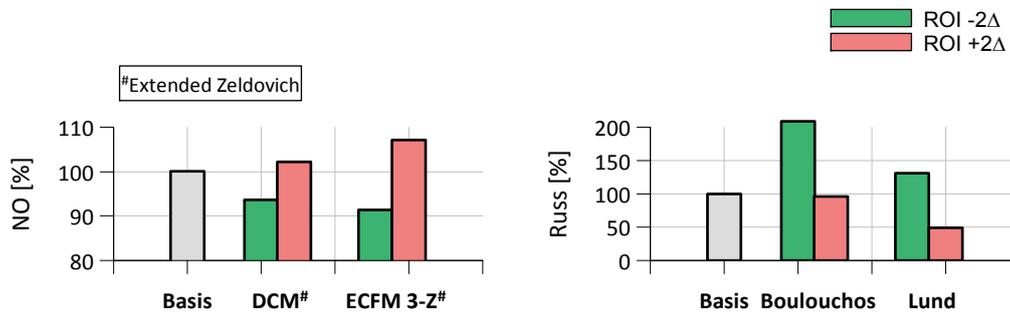


Abbildung 5-20: Auswirkungen der Öffnungsflanke der Einspritzrate auf  $\text{NO}_x$  und Ruß

Auch die eingesetzten Russmodelle verdeutlichen eine unterschiedlich große Abweichung im Vergleich zur Basis. Das Boulouchos-Modell berechnet für eine flachere Öffnungsflanke sogar eine doppelt so große Russkonzentration als die Basis. Das reaktionskinetische Lund Modell berechnet für eine steile Öffnungsflanke in etwa die Hälfte der Russkonzentration der Basis.

Analog zur Variation der Öffnungsflanke wirkt sich auch die Schließflanke der Einspritzrate auf die Simulation aus. Aufgrund der Ähnlichkeit der Ergebnisse wird an dieser Stelle auf eine explizite Darstellung verzichtet. Explizite Ergebnisse für die Schließflanke sind unter einer Veröffentlichung des Autors zu finden[63].

Die in diesem Kapitel vorgestellten Sensitivitätsstudien belegten, dass der exakte Verlauf der Einspritzrate von entscheidender Bedeutung für die Simulation ist. Detaillierte Vorgaben für Spritzbeginn, Durchfluss und Flankenform sind für eine hohe Simulationsgüte erforderlich. Bei der Generierung von synthetischen Einspritzraten ist auch noch darauf zu achten, dass der maximale Düsenadelhub über der Einspritzdauer nicht für alle Einspritzdüsen konstant angenommen werden darf. Untersuchungen am Pumpenprüfstand zeigten, dass Unterschiede in Abhängigkeit vom Durchfluss auftreten [64], siehe auch Abbildung 5-21.

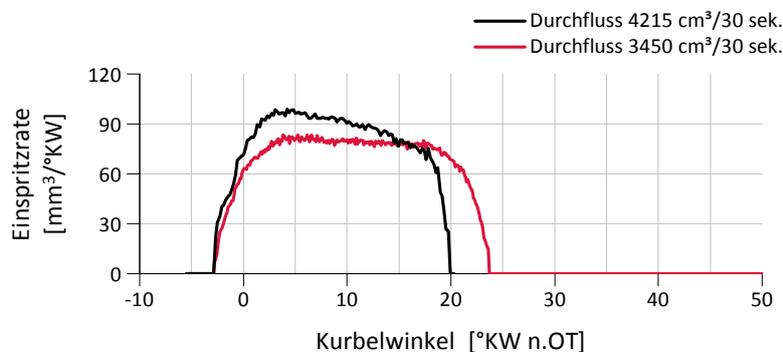


Abbildung 5-21: Einspritzraten unterschiedlicher Einspritzdüsen für gleiche Kraftstoffmasse und Einspritzdruck

Für Großmotoren ist daher entgegen den Empfehlungen von *Bauer* [58] die Begrenzung der Kontur einer synthetischen Einspritzrate durch eine Parallele zur Abszisse nicht für alle Einspritzdüsen zulässig.

## 5.5 Schlussfolgerungen zur Einspritzrate

Die beschriebenen Simulationsergebnisse mit Bernoulli- und Strahlkrifteinspritzrate zeigten eine nicht zu vernachlässigende Auswirkung auf die Berechnung von Verbrennung und Schadstoffbildung. Bei all den durchgeführten Simulationen traten deutliche Unterschiede in der Berechnung von Stickoxid und Russ auf.

Eine Zusammenfassung der Eignung der beschriebenen Methoden zur Bestimmung der Einspritzrate hinsichtlich Einspritzbeginn, Durchfluss sowie ansteigender und fallender Flanke verdeutlicht Tabelle 5-1.

	Spritzbeginn	Maximalwert	Flanke	
			ansteigend	abfallend
Ansteuersignal	--	--	--	--
Raildruck+Nadelhub	-	--	+	+
Strahlkraft	++	++	++	++

Tabelle 5-1: Bewertung von Methoden zur Bestimmung der Einspritzrate

Wie aus der Tabelle ersichtlich, kann allein mit dem Ansteuersignal des Injektors keine vernünftige Aussage über den tatsächlichen Einspritzverlauf gemacht werden. Besonders die Unkenntnis der zeitlichen Zuordnung des Stromsignals zum tatsächlichen Spritzbeginn (vgl. Abbildung 5-7) führt zu keinen belastbaren Aussagen über den Einspritzverlauf.

Im Gegensatz dazu lässt sich mit einem gemessenen Raildruck-Verlauf über den beim Nadelöffnen hervorgerufenen Druckabfall eine zeitliche Zuordnung zum Einspritzbeginn herstellen. Allerdings kann die Trägheit der Düsennadel zu Verzögerungen bzw. Verfälschungen im Signalverlauf führen [58]. Die auftretenden Unterschiede der Form der Einspritzraten sind bei Teillastpunkten stärker ausgeprägt. Die Flanken für Bernoulli- und Strahlkraft-Einspritzrate ähneln einander und weisen keine maßgeblichen Unterschiede auf.

Ein deutlicher Einfluss auf die Simulation von Verbrennung und Schadstoffbildung konnte durch die unterschiedlichen Arten der Einspritzratenbestimmung festgestellt werden. Vor allem eine detaillierte Prognose von Stickoxid und Russ setzt einen exakt ermittelten Einspritzratenverlauf voraus.

## 6 Bewertung der Prognosefähigkeit

### 6.1 Modellabstimmung

Der Prozess der Modellabstimmung stellt für den Entwicklungsingenieur in den meisten Fällen eine zeitintensive Aufgabe dar. Der Kalibrierungsprozess setzt Messungen vom Prüfstandsversuch wie Zylinderdruck, Massenströme und Temperaturen voraus. Um den Zeitaufwand für die Modellabstimmung zu minimieren, ist nicht nur die richtige Vorgehensweise von Bedeutung, sondern auch zwischen den Routinen einer null- und dreidimensionalen Modellabstimmung zu unterscheiden. Auch der bereits in Kapitel 5 beschriebene Einfluss der Einspritzrate stellt ein maßgebendes Kriterium auf die Abstimmung von Verbrennungsmodellen dar.

- 0D-Modellabstimmung

Für die nulldimensionale Simulation ist neben der Abstimmung der Motorgasdynamik, die Kalibrierung der Konstanten für null- und quasidimensionale Verbrennungsmodelle entscheidend. Anhand der in Abbildung 6-1 dargestellten Vorgangsweise wird die chronologisch richtige Vorgangsweise für die nulldimensionale Brennratenmodellabstimmung erklärt.

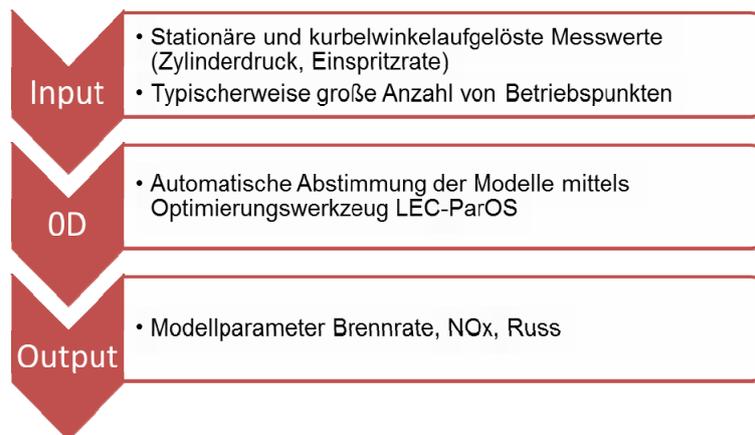


Abbildung 6-1: Vorgehensweise bei der 0D-Modellkalibrierung

Als notwendige Eingabe- und Vergleichsgrößen für die Simulation sind sowohl langsame- (z.B. Kraftstoffmasse, Luftmasse ...) als auch kurbelwinkelabhängige Messdaten (z.B. Zylinderdruck, Brennrate ...) notwendig. Der automatisierte Optimierungsprozess der Modellparameter wird typischerweise an einer großen Anzahl von Betriebspunkten durchgeführt. Einerseits um Parameterabhängigkeiten zu minimieren, andererseits um eine höhere allgemeine Gültigkeit zu erreichen.

Der automatisierte Optimierungsprozess erfolgt mit einem eigens am LEC entwickelten Optimierungswerkzeug [21]. Der Anwender definiert nur über eine Zielfunktion die Abweichung zwischen simulierter und gemessener Brennrate (vgl. Gleichung (6-1)),

$$F_1 = \sum_{i=i_{SOC}}^{i_{EOC}} (dQ_{Sim,i} - dQ_{Mess,i})^2 \quad (6-1)$$

Auf Grundlage der Abweichung der kleinsten Fehlerquadrate zwischen gemessener und

simulierter Brennrate wird vom „Optimierer“ eine optimale Parameterkonfiguration ermittelt. Für die in Kapitel 6.2 beschriebenen Variationen war die Findung eines gemeinsamen Parametersatzes für das nulldimensionale DCM-Modell mit einer automatisierten Parameteroptimierung erforderlich.

Die globalen Modellparameter des MZCM-Modells wurden nach den Empfehlungen von *Pötsch* [77] auf händischer Basis ermittelt. Die Kalibrierung des Multi-Zonen Modells beschränkt sich auf die Abstimmung der Parameter für Ladungs-Entrainment, Verdampfung und chemischer Reaktion, da die Wärmefreisetzung durch diese drei Mechanismen kontrolliert wird.

- 3D-CFD Modellabstimmung

Die Abstimmung der 3D-CFD Simulation erweist sich als wesentlich aufwendiger, da eine größere Anzahl von Parametern für komplexe physikalische Modelle abzustimmen ist. Ausgehend vom CFD-Berechnungsgitter, welches vom Anwender problemangepasst zu erstellen ist, spielt auch die Art der Netzgenerierung eine Rolle. Die in dieser Arbeit verwendeten Berechnungsgitter wurden nach den Empfehlungen von *Schaffer* [37] erstellt, welche zwecks besserer Abbildung lokaler Turbulenzeffekte die Düsenkuppe und einen strukturierten, fixen Einspritzstrahlblock beinhalten. Komplexe Geometrien wie Ventiltaschen und Nischen wurden aus Symmetriegründen vernachlässigt. Die Simulation der Einspritzung, Verbrennung und Schadstoffbildung erfolgt daher auf strahlangepassten Sektornetzen mit ca. 100.000 Zellen (vgl. Abbildung 6-2).

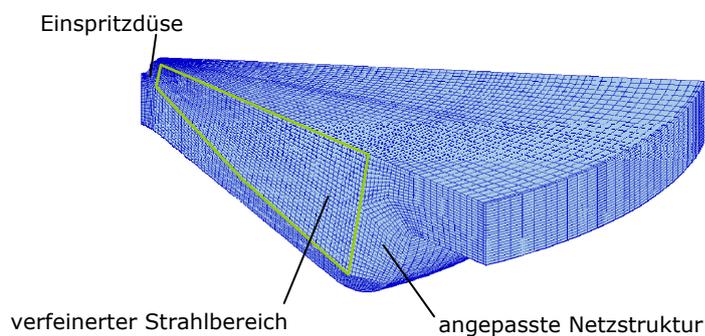


Abbildung 6-2: Verwendetes Sektornetz zur Simulation der Einspritzung, Verbrennung und Schadstoffbildung

Nach erfolgter Netzgenerierung kann damit begonnen werden, die notwendigen Eingabegrößen für das Steuerfile anzupassen. Entscheidend ist die Auswahl und Kalibrierung von Spray-, Verbrennungs- und Emissionsmodellen. Die Beschreibung des Sprays erfolgt in FIRE<sup>®</sup> auf Basis der Diskreten Tropfen Methode<sup>3</sup>. Ein Tropfenpaket besteht aus vielen identischen Einzeltropfen, die sich gemeinsam bewegen, aufbrechen und verdampfen. Die Formulierung des Tropfensekündärzerfalls erfolgt nach dem Wave-Child Modell nach *Liu* und *Reitz* [90], wobei zusätzlich auch die turbulente Dispersion der Tropfen mit dem Modell von *O'Rourke* modelliert wird [91]. Die Tropfenverdampfung wird mit dem Modell nach *Dukovicz* [92] beschrieben. Zur Abbildung der Strahl-Wandinteraktion wurde das Walljet1-Modell von *Naber* und *Reitz* verwendet [93].

---

<sup>3</sup> DDM (Discrete Droplet Model) beschreibt die Flüssigphase in Lagrange'scher Betrachtungsweise, während die Gasphase (Continuous Phase) nach der Euler-Methode berechnet wird.

Nach erfolgter Auswahl der Modelle, kann mit dem Kalibrierungsprozess begonnen werden. Eine Abstimmung des Sprays setzt in der Regel Messergebnisse aus optischen Untersuchungen voraus, wobei teilweise auch auf Erfahrungswerte zurückgegriffen wird. Die Abstimmung der Sprayparameter erfolgt anhand eines gewählten Basispunkts, sodass sich eine möglichst gute Korrelation für Penetrationslänge  $s$  und Strahlkegelwinkel  $\Theta$  zwischen Messung und Simulation ergibt. Der Spraywinkel wird dabei bis zum Abstand  $x(t)=0.7 \cdot s(t)$  mit Hilfe zweier Geraden an der oberen und unteren Strahlkontur bestimmt. In weiterer Folge ist ein Abgleich von Strahl-Wandkontaktmodellen für die 3D-CFD Simulation hilfreich, da bei Volllast und unter Kaltstartbedingungen die erhöhte Eindringtiefe des Strahls zum Wandkontakt führen kann. Schließlich begünstigt auch der Strahl-Wand-Kontakt die Bildung von Kohlenwasserstoffen und Russ.

In Tabelle 6-1 ist am Beispiel eines optisch untersuchten Einspritzstrahls [37] die Übereinstimmung für Penetrationslänge und Kegelwinkel für Messung und Simulation dargestellt. Die Erfahrungswerte zur Abstimmung der Wandinteraktionsmodelle beruhen auf den Ergebnissen von *Hirschl* [94].

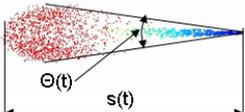
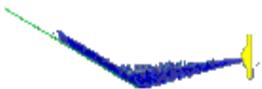
Optische Untersuchung	Simulation	Optische Untersuchung	Simulation
<i>Versuch</i>	<i>3D-CFD</i>	<i>Versuch</i>	<i>3D-CFD</i>
			

Tabelle 6-1: Vergleich für Spraykegel und Wandinteraktion aus optischer Untersuchung und 3D-CFD Simulation

Im nächsten Schritt empfiehlt sich eine Validierung des erhaltenen Parametersatzes anhand von weiteren Betriebspunkten. Umfangreiche optische Untersuchungen bzw. Einspritzversuche können für eine Verifikation herangezogen werden. Anhand von Abbildung 6-3 ist die empfohlene Vorgehensweise zur Abstimmung der 3D-CFD Modellkette dargestellt.

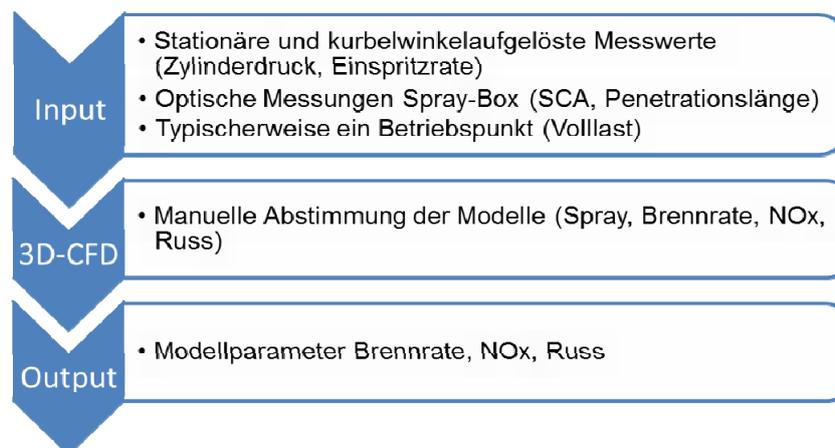


Abbildung 6-3: Vorgehensweise bei der 3D-CFD Modellkalibrierung

In der vorliegenden Arbeit wurde die für einen Volllastpunkt ermittelte Konfiguration auch für die Teillast verwendet. Sind vermessene Einspritzraten vorhanden, ist auch eine Modellkalibrierung mit Standardmodellparametern möglich bzw. zielführend.

## 6.2 Einfluss wesentlicher Entwicklungsparameter

In diesem Kapitel werden Simulationsergebnisse für Verbrennung und Schadstoffbildung mit Messwerten aus der Analyse für eine fixe Parameterbelegung der Brennratenmodelle dargestellt. Den untersuchten Variationen liegen vermessene Einspritzraten nach der Strahlkraftmethode zu Grunde. Die Tauglichkeit der Simulation zur Berechnung der Verbrennung wurde anhand von repräsentativen Parametervariationen bewertet, eingesetzt wurde jeweils ein null- und ein dreidimensionales Verbrennungsmodell. Für die betrachteten Variationen wurde am Prüfstand immer die gleiche Hardware verwendet. Als Emissionsmodelle kam das NO-Modell nach Pattas und für Russ aufgrund der Erfahrungen von *Schaffer* [37] das *Lund-Modell* [89] zum Einsatz.

### 6.2.1 Variation der Last und Drehzahl

Die Bewertung der Prognosefähigkeit der Simulationsmodelle für Last und Drehzahl stellt ein wesentliches Kriterium dar. Einerseits zur Verifizierung der allgemeinen Gültigkeit der Parameter, andererseits um die Eignung der Modelle für eine Variation von Motorlast und Drehzahl beurteilen zu können. Auch der mit abnehmender Motorlast zunehmende Anteil der vorgemischten Verbrennung, welcher sich wegen des längeren Zündverzugs aufgrund des niedrigeren Druck- und Temperaturniveaus einstellt, muss von den Modellen darstellbar sein, um in weiterer Folge eine korrekte Prognose des Emissionsniveaus sicherzustellen.

Ein Vergleich der simulierten Brennraten mit den Brennraten aus der Analyse für drei unterschiedliche Lastpunkte mit variabler Drehzahl zeigt Abbildung 6-4. Zusätzlich sind in der Abbildung auch die für die Simulation zu Grunde gelegten lastpunktabhängigen Einspritzraten dargestellt, welche am Pumpenprüfstand mittels Strahlkraftmethode vermessen wurden. Der am Einzylinder-Forschungsmotor eingesetzte Einspritzdruck betrug 1800 bar, als Ventilsteuerzeit wurde ein Miller-Verfahren eingesetzt.

Für den untersuchten Volllastpunkt zeigen die eingesetzten Simulationsmodelle eine ansprechende Übereinstimmung mit der Analyse. Auch der durch das Miller-Verfahren hervorgerufene erhöhte vorgemischte Verbrennungsanteil wird von den Modellen qualitativ und quantitativ hochwertig dargestellt.

Für den 70% Lastpunkt zeigt sich in Analogie zum Volllastpunkt ein nahezu identes Verhalten. Größere Abweichungen sind lediglich beim quasidimensionalen MZCM-Modell für den Vormischanteil erkennbar. Die Überhöhung des Vormischanteils deutet darauf hin, dass im Modell augenblicklich zu viel Kraftstoff verdampft. Die Übereinstimmung der Modelle DCM und EZFM-3Z mit der Analyse darf als hervorragend bezeichnet werden.

Für den 30% Lastpunkt ist aufgrund des sehr niedrigen Druck- und Temperaturniveaus anstelle der Diffusions- nur mehr eine reine vorgemischte Verbrennung feststellbar. Auch für die untere Teillast weist der fixe Parametersatz eine hervorragende Übereinstimmung für das ECFM-3Z Verbrennungsmodell auf. Für das nulldimensionale DCM und quasidimensionale MZCM-Modell ist hingegen eine schlechtere Korrelation der Brennraten zu bemerken.

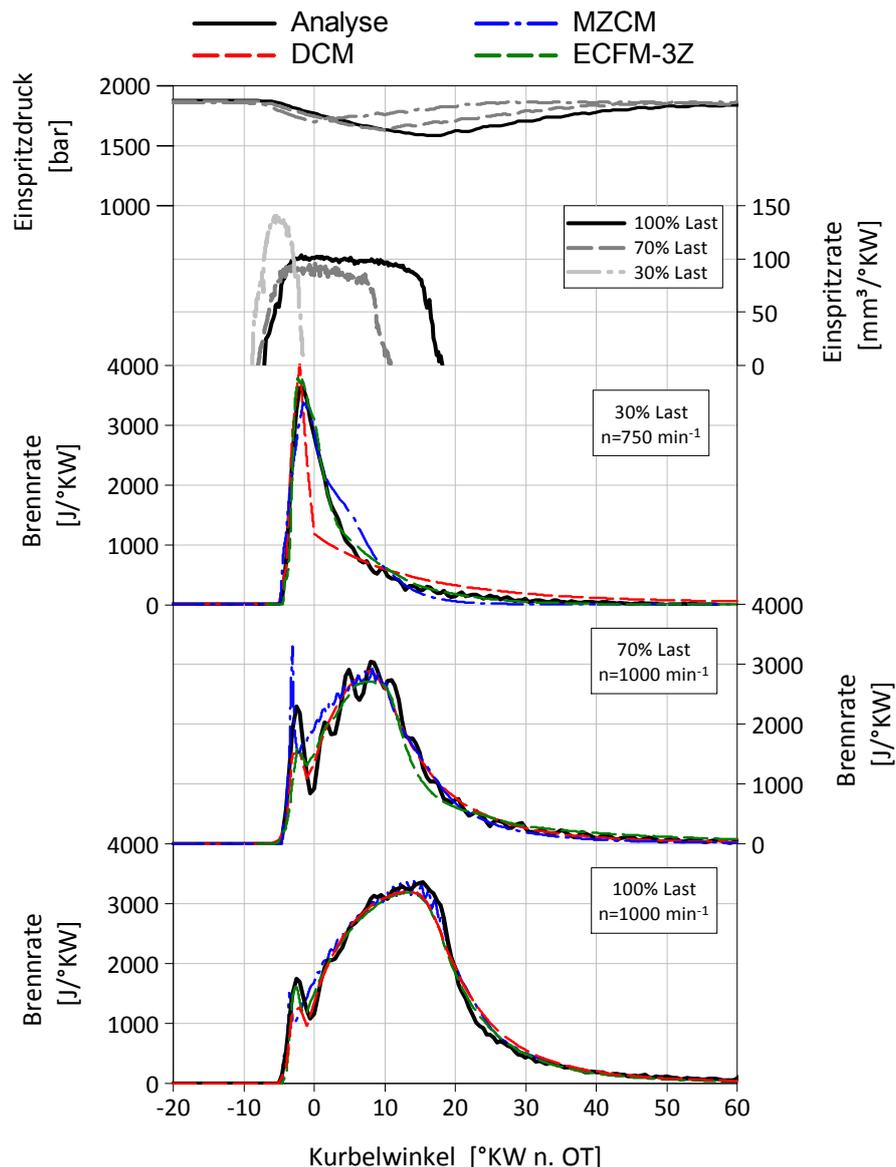


Abbildung 6-4: Brennratensimulation für die Variation von Last und Drehzahl

Die doch hervorragende Korrelation der simulierten Brennraten mit der Analyse lässt auch für die Berechnung von Stickoxid und Russ eine realistische Prognose erwarten. Die Berechnung von Verbrennungstemperatur und Spezieskonzentrationen für das NO-Modell erfolgt auf Basis der beschriebenen Brennratenmodelle nach Kapitel 3. Die verwendeten Stickoxidmodelle legen jeweils den erweiterten Zeldovich-Mechanismus und dem NO-Formalismus nach Pattas zu Grunde. Prompte und Kraftstoff-NO-Bildung wurde nicht berücksichtigt.

Abbildung 6-5 veranschaulicht den Vergleich der Schadstoffemissionen für Stickoxid und Russ zwischen Messung und Simulation. Die gemessenen NO-Konzentrationen werden im Allgemeinen gut wiedergegeben. Vor allem wenn die Verbrennung durch ein reaktionskinetisches Modell berechnet wurde. Der Trend für Russ lässt sich selbst mit einem reaktionskinetischen Modell über der Last nicht darstellen. Grund dafür ist neben der Änderung der Last auch die abgesenkte Motordrehzahl im 30% Lastpunkt.

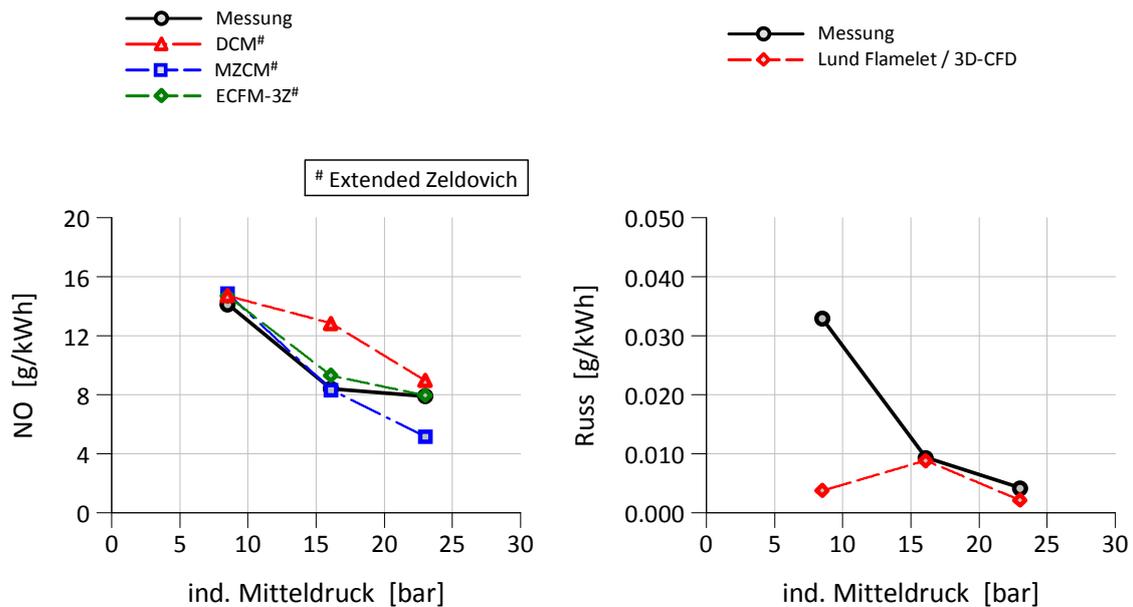


Abbildung 6-5: Darstellung von berechneter und gemessener Stickoxid- und Russkonzentration in Abhängigkeit von Last und Drehzahl

Generell spiegeln die berechneten Brennraten mit dem konstanten Modellparametersatz eine gute Übereinstimmung mit der Analyse wider. Abweichungen in der simulierten NO-Konzentration sind vor allem beim null- und quasidimensionalen Modell zu beobachten.

### 6.2.2 Variation der AGR-Rate

Um Aussagen über die Güte von Brennverlaufs- und Emissionsmodellen für unterschiedliche Ladungszusammensetzungen zu treffen, wurden Vollast- und Teillastpunkte mit unterschiedlichen Abgasrückführaten am Prüfstand gemessen und mit Simulationsergebnissen verglichen. Die Abgasrückführung stellt eine für Großmotoren wesentliche Entwicklungsmaßnahme dar, um die im Jahr 2015 in Kraft tretenden Emissionsgesetzgebungen innermotorisch erfüllen zu können [44]. Aus diesem Grunde ist die richtige Abbildung unterschiedlicher Ladungszusammensetzungen durch die Simulationsmodelle unerlässlich.

- Volllast

In Abbildung 6-6 sind simulierte und analysierte Brennverläufe sowie die zu Grunde gelegten vermessenen Einspritzraten der Volllast für eine fixe Parameterbelegung der Modelle dargestellt. Zur Realisierung der NO<sub>x</sub>-Emissionsniveaus EU IIIB und US EPA TIER4 wurde die AGR-Rate erhöht, um die lokale Verbrennungstemperatur zu senken und dadurch Stickoxid zu reduzieren. Diese Maßnahme senkt allerdings den Wirkungsgrad des vollkommen Motors [5]. Weiters wurde für den Prüfstandsversuch ein Hochdrallzylinderkopf eingesetzt, um die Auswirkungen der erhöhten Ladungsbewegung in Kombination mit AGR zu untersuchen.

Anhand des Vergleichs der Brennraten für den Lastpunkt mit 4 g/kWh Stickoxidemissionsniveau erkennt man, dass der konstante Modellparametersatz für das null- und quasidimensionale Verbrennungsmodell eine deutliche Abweichung für den maximalen Energieumsatz und die Ausbrennphase aufweist. Grund dafür stellt die in den Modellen

mangelhafte Berücksichtigung des Drallniveaus im Zylinder dar. In der CFD-Simulation wird jedoch die Wirkung der erhöhten Ladungsbewegung mitberücksichtigt und dadurch eine sehr hohe Übereinstimmung zwischen Simulation und Analyse erreicht.

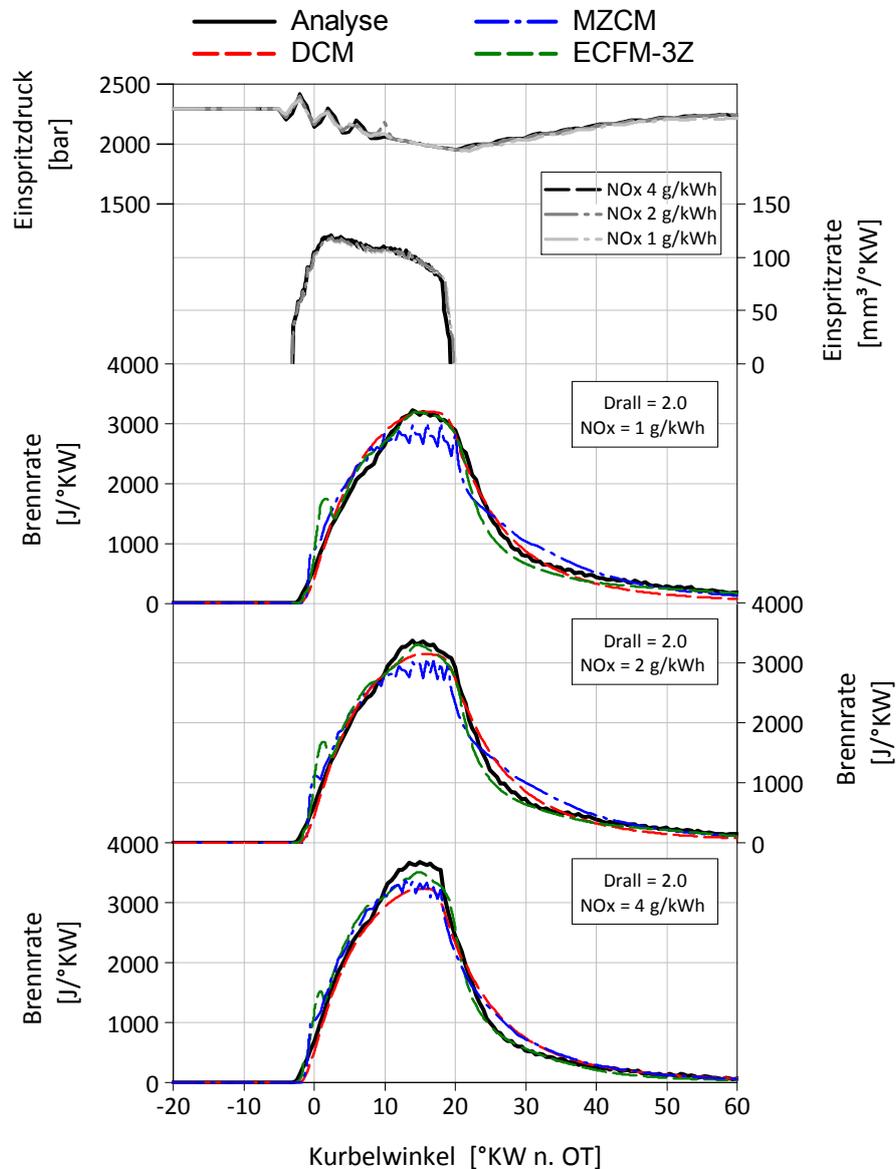


Abbildung 6-6: Variation der AGR-Rate mit hohem Drall für Volllast

Weiters ist für geringere NO<sub>x</sub>-Emissionsniveaus eine größere Abweichung der Modelle DCM und MZCM erkennbar, da in erster Linie das DCM-Modell den Einfluss der durch AGR hervorgerufenen langsameren Brenngeschwindigkeit nicht abbildet. Für das DCM-Modell ist daher eine Korrektur des Einflusses der Ladungsverdünnung auf die Mischung von Luft mit Kraftstoff über das Spraymodell erforderlich. Im Gegensatz dazu zeigt das ECFM-3Z Modell eine realistische Berücksichtigung der Ladungsverdünnung und Turbulenz und zusätzlich eine hervorragenden Übereinstimmung mit der Analyse.

Die Emissionen für Stickoxid und Russ sind in Abbildung 6-7 im Vergleich zur Messung dargestellt. Die eingesetzten Emissionsmodelle wurden auf den 0% AGR-Punkt kalibriert, um deren Korrelation mit der Messung für steigende AGR-Raten zu demonstrieren. Vor allem die nulldimensionale Betrachtung weist aufgrund der nicht exakten Übereinstimmung der Brennraten eine zu gering berechnete NO-Konzentration auf.

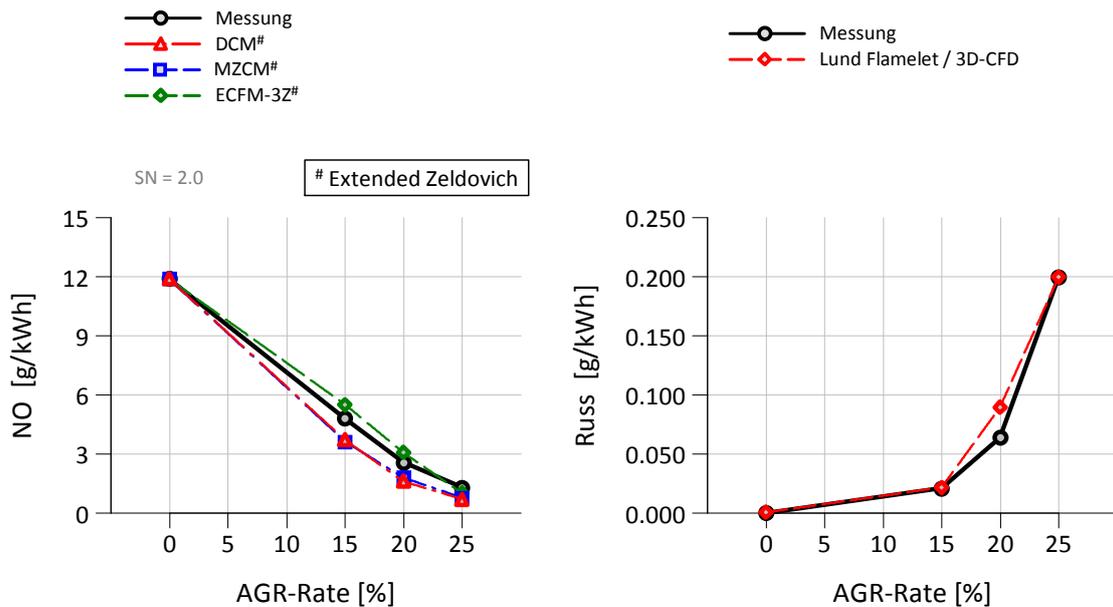


Abbildung 6-7: Vergleich von berechneter und gemessener Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation der AGR-Rate für Vollast

Im Gegensatz zu den Ergebnissen der nulldimensionalen Modelle stellt sich mit dem ECFM-3Z Modell aufgrund der idealen Brennratenübereinstimmung eine hervorragende Übereinstimmung für Stickoxid ein. Ebenso wird bei der Berechnung von Russ nicht nur der Trend, sondern auch quantitativ eine sehr gute Übereinstimmung mit der Messung erzielt.

- Teillast

Um die Wirkung von AGR anhand von zyklusrelevanter Teillastpunkte beurteilen zu können, wurden Messungen am Einzylinder-Forschungsmotor für 7 bar indiziertem Mitteldruck und einer Motordrehzahl von  $888 \text{ min}^{-1}$  durchgeführt. In diesem Zusammenhang sei nochmals erwähnt, dass alle relevanten Konstanten der Brennratenmodelle wie auch bei den vorherigen Parametervariationen konstant gehalten wurden.

Abbildung 6-8 veranschaulicht die Simulationsergebnisse der eingesetzten Brennratenmodelle im Vergleich zur Analyse. Die analysierte Brennrate des hohen Stickoxidemissionsniveaus ( $4 \text{ g/kWh}$ ) setzt sich aus Vormisch- und Diffusionsanteil zusammen. Die Brennraten für das niedere Emissionsniveau zeigen aufgrund der gestiegenen AGR-Rate und des längeren Zündverzugs nur mehr eine rein vorgemischte Verbrennung.

Die Simulationsergebnisse weisen im Vergleich zu den Resultaten der Vollast einen Genauigkeitsverlust auf. In erster Linie ist für das null- und quasidimensionale Verbrennungsmodell eine Ungenauigkeit in der Abbildung relativ kleiner Diffusionsanteile ersichtlich. Das ECFM-3Z Verbrennungsmodell bildet hingegen vorgemischte und Diffusionsverbrennung aufeinanderfolgend ab, jedoch mit zu hohen Diffusionsanteilen. Um dem entgegenzuwirken, wäre eine Modifizierung des verwendeten Parametersatzes denkbar. Allerdings sollte die Eignung der Modelle für die Vorausrechnung anhand der fix zu Grunde gelegten Modelleinstellungen bewertet werden.

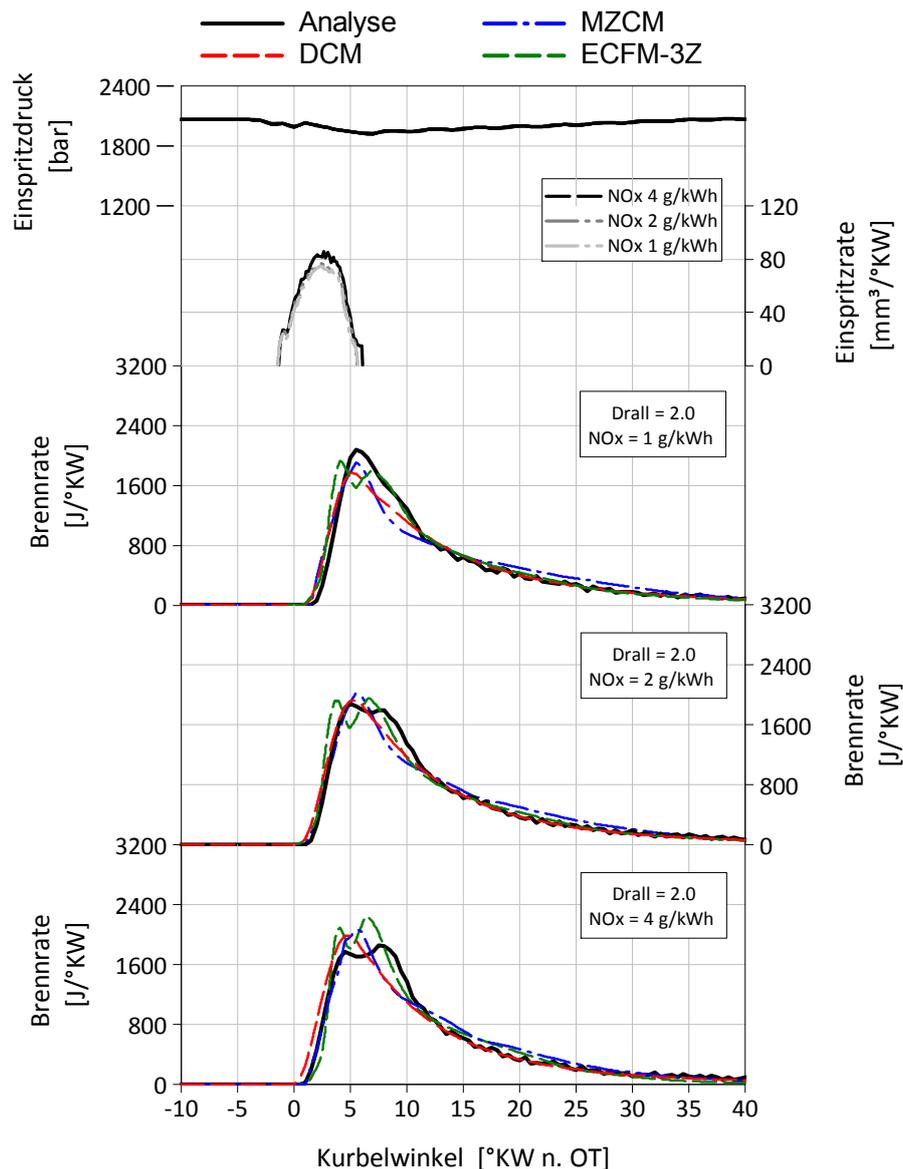


Abbildung 6-8: Variation der AGR-Rate mit hohem Drall für Teillast

Wie schon bei den theoretischen Überlegungen zur Bildung des thermischen Stickoxids erklärt wurde, stellt die Verbrennungstemperatur einen maßgebenden Einfluss auf die erzeugte NO-Konzentration dar. Deshalb hängt die Richtigkeit der Ergebnisse maßgebend davon ab, inwieweit eine Übereinstimmung für Brennverlauf und Temperatur mit den eingesetzten Modellen erreicht wird.

In Abbildung 6-9 sind auf Grundlage der zuvor beschriebenen Brennratensimulation die resultierenden Verläufe für Stickoxid und Russ dargestellt. Die Kalibrierung der Modelle wurde anhand des 0% AGR-Punkts durchgeführt. Offensichtlich wird auf Basis der Brennratenmodelle DCM und MZCM durch das NO-Modell eine zu geringe Stickoxidkonzentration berechnet. Dies hängt unmittelbar damit zusammen, dass aus der Simulation der Brennrate eine falsche Temperaturinitialisierung im NO-Modell erfolgt. Auch ist beim DCM-Modell die Steuerung des lokalen stöchiometrischen Luftverhältnisses über eine Konstante erforderlich. Unterschiede im lokalen Lambdaverlauf führen nach Kapitel 4.1.5 zu größeren Abweichungen in der Teillast.

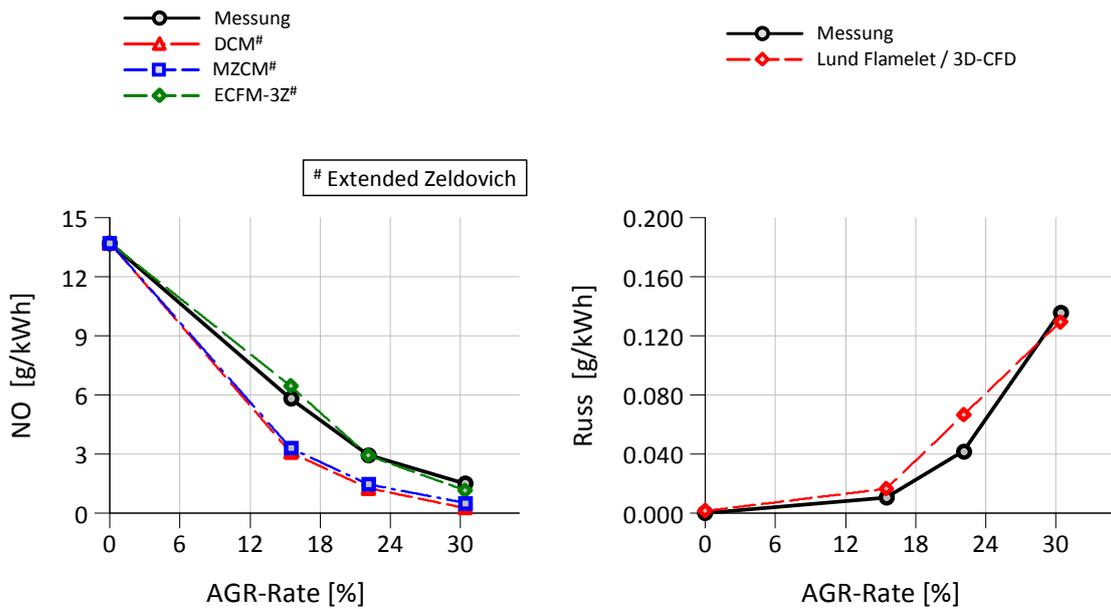


Abbildung 6-9: Vergleich von berechneter und gemessener Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation der AGR-Rate für Teillast

Im Gegensatz zu den nulldimensionalen Modellen zeigt das ECFM-3Z Modell eine hervorragende Korrelation zwischen NO-Simulation und Messung. In einigen Fällen liegt die mittlere Abweichung zwischen Simulation und Messung sogar unter 3%. Die Russberechnung mit dem komplexen reaktionskinetischen Mechanismus des Lund-Modells weist eine ebenfalls gute Übereinstimmung im Trend und Absolutwert auf.

### 6.2.3 Variation Einspritzdruck

Bei der Entwicklung von Brennverfahren für Dieselmotoren stellt der Einspritzdruck eine wesentliche Größe dar. Die mit aktuellen Common-Railsystemen mögliche Steigerung des Einspritzdrucks auf bis zu 3000 bar erlaubt nicht nur eine Optimierung der Russemissionen, sondern auch eine Verbesserung für Verbrauch und Wirkungsgrad [88]. Mit dem heutigen Stand der Technik bei Common-Railsystemen ist sogar für die Teillast die Bereitstellung von hohen Einspritzdrücken möglich, da der Systemdruck nahezu unabhängig von der Motordrehzahl erzeugt wird [53].

- Volllast

Die Beurteilung der wichtigen Variation Einspritzdruck wurde nachfolgend anhand der drei eingesetzten Verbrennungsmodelle DCM, MZCM und ECFM-3Z durchgeführt. Stellvertretend für die gesamte Variation zeigt Abbildung 6-10 die Ergebnisse der Simulation und der Analyse für drei unterschiedliche Einspritzdruckniveaus. Der Modellparametersatz blieb unverändert und ident zu den Variationen zuvor. Die für die Simulation verwendeten gemessenen Einspritzraten sind ebenfalls in der Abbildung dargestellt. In diesem Beispiel kam eine 8-Lochdüse mit 145° Spritzlochwinkel und einem Durchfluss von 4215 cm<sup>3</sup>/30sec zur Anwendung.

Durch die geringen Abweichungen der Simulationsergebnisse von der Messung über die gesamte Brenndauer ist zu erkennen, dass die eingesetzten Modelle eine sehr hohe Vorhersagegenauigkeit bei Variation des Parameters Einspritzdruck erreichen.

Abweichungen zur Messung sind beim DCM-Modell in der Ausbrennphase feststellbar. Für das MZCM und ECFM-3Z Modell zeigt der aktuelle Parametersatz eine geringe Abweichung im Absolutniveau der Brennrate.

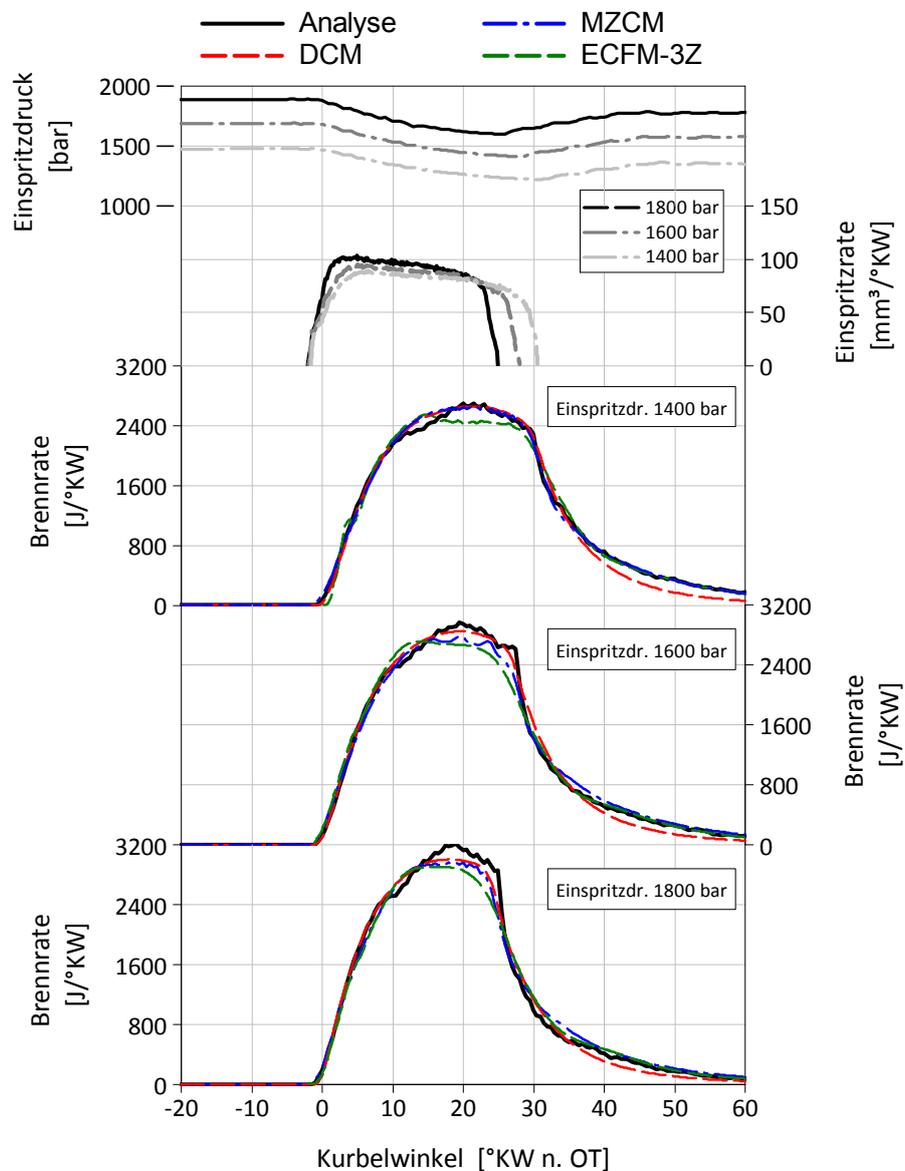


Abbildung 6-10: Variation des Einspritzdrucks für Volllast

Trotzdem weist die Kombination aus vermessener Einspritzrate und fixer Parameterbelegung der Verbrennungsmodelle für die Raildruckvariation eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Analyse auf.

Das resultierende Emissionsniveau der untersuchten Einspritzdruckvariation für Stickoxid und Russ spiegelt Abbildung 6-11 wieder. Anhand des Basispunktes mit 1200 bar Einspritzdruck wurde die Prognosefähigkeit der Schadstoffbildungsmodelle bewertet. Der Druck wurde in Abständen von jeweils 200 bar bis auf 1800 bar erhöht. Die Anpassung der Emissionsmodellkonstanten in Zusammenhang mit den Verbrennungsmodellen fand entsprechend den Messwerten im Volllast-Basispunkt bei einem Einspritzdruck von 1200 bar statt.

Wie in den Abbildungen erkennbar, kann sowohl Stickoxid als auch Russ für eine Variation des Einspritzdrucks quantitativ sehr gut vorausberechnet werden.

Vor allem die eingesetzten Brennratenmodelle DCM und ECFM-3Z ermöglichen in weiterer Folge eine hervorragende Prognose für Stickoxid. Obwohl die Brennraten zwischen DCM und MZCM nahezu gleich sind, treten bei der Stickoxidberechnung im 1800 bar Punkt bei MZCM doch Abweichungen von ca. 20% auf. Offensichtlich berechnet MZCM eine zu hohe Temperatur für die verbrannte Zone, weswegen eine Neukalibrierung von Verdampfung und Re-Entrainment von Sauerstoff in die Verbrennungszone erforderlich wäre.

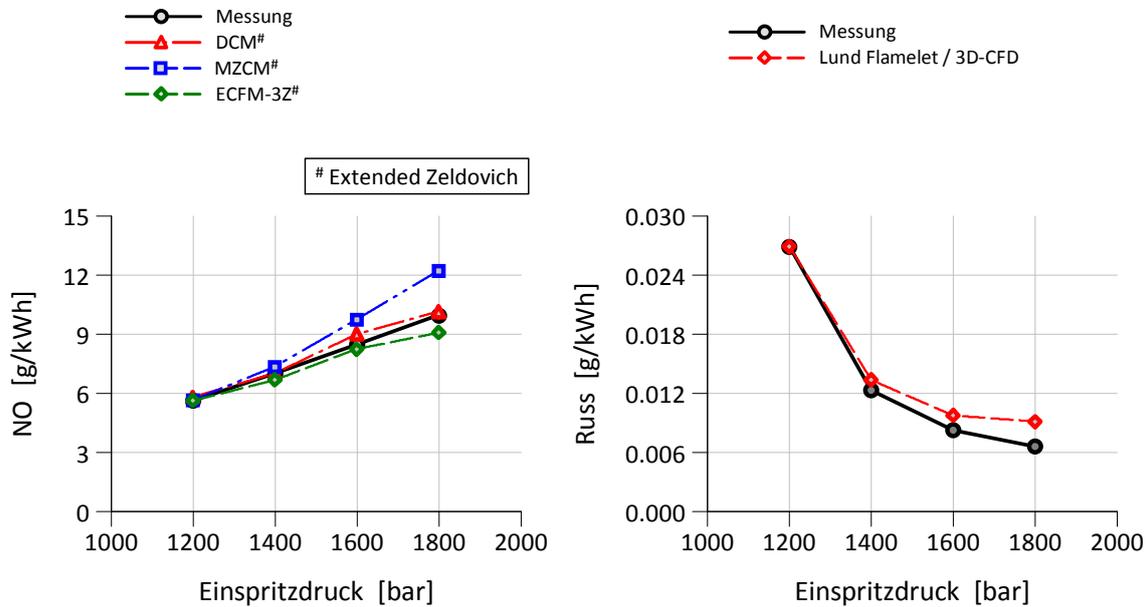


Abbildung 6-11: Vergleich von berechneter und gemessener Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Einspritzdrucks für Volllast

Die Simulationsergebnisse für Russ belegen für die untersuchte Einspritzdruckvariation eine exzellente Übereinstimmung für Trend und auch Absolutwert. In Summe ergibt sich mit dem eingesetzten Russmodell ein mittlerer relativer Fehler von ca. 16 % für die gesamte Variation (vgl. Tabelle 6-3).

- Teillast

Abbildung 6-12 erläutert die Simulationsergebnisse der Einspritzdruckvariation der Teillast für einen indiziertem Mitteldruck von 10 bar und eine Motordrehzahl von  $888 \text{ min}^{-1}$ . Für die Teillast blieb der verwendete Modellparametersatz unverändert. Wie vorhin wurden vermessene Einspritzraten für die Brennratensimulation verwendet.

Für diesen Lastfall können Zündverzug, an- und absteigende Flanken der Brenngesetze sehr genau vorausberechnet werden. Geringe Abweichungen treten im Bereich der maximalen Umsatzrate und gegen Ende der Verbrennung in der Ausbrennphase auf. Offensichtlich tritt beim MZCM-Modell jedoch ab etwa  $20^\circ\text{KW}$  nach OT eine wesentlich schnellere Verbrennung und ein früheres Brennende auf, da ein zu hohes Re-Entrainment von Restsauerstoff in die Verbrennungszone stattfindet. Anpassungen können im Modell über die „Re-Entrainment Konstante“ vorgenommen werden.

Die Simulationsergebnisse für das ECFM-3Z Verbrennungsmodell ergeben für hohe Einspritzdrücke eine zu große Ausprägung der vorgemischten Verbrennung und Abweichungen im Absolutniveau des Brennverlaufs. Trotz der zuvor beschriebenen Unterschiede ist sowohl für das ECFM-3Z als auch für das DCM-Modell eine hohe Qualität

in der Übereinstimmung mit Messergebnissen feststellbar.

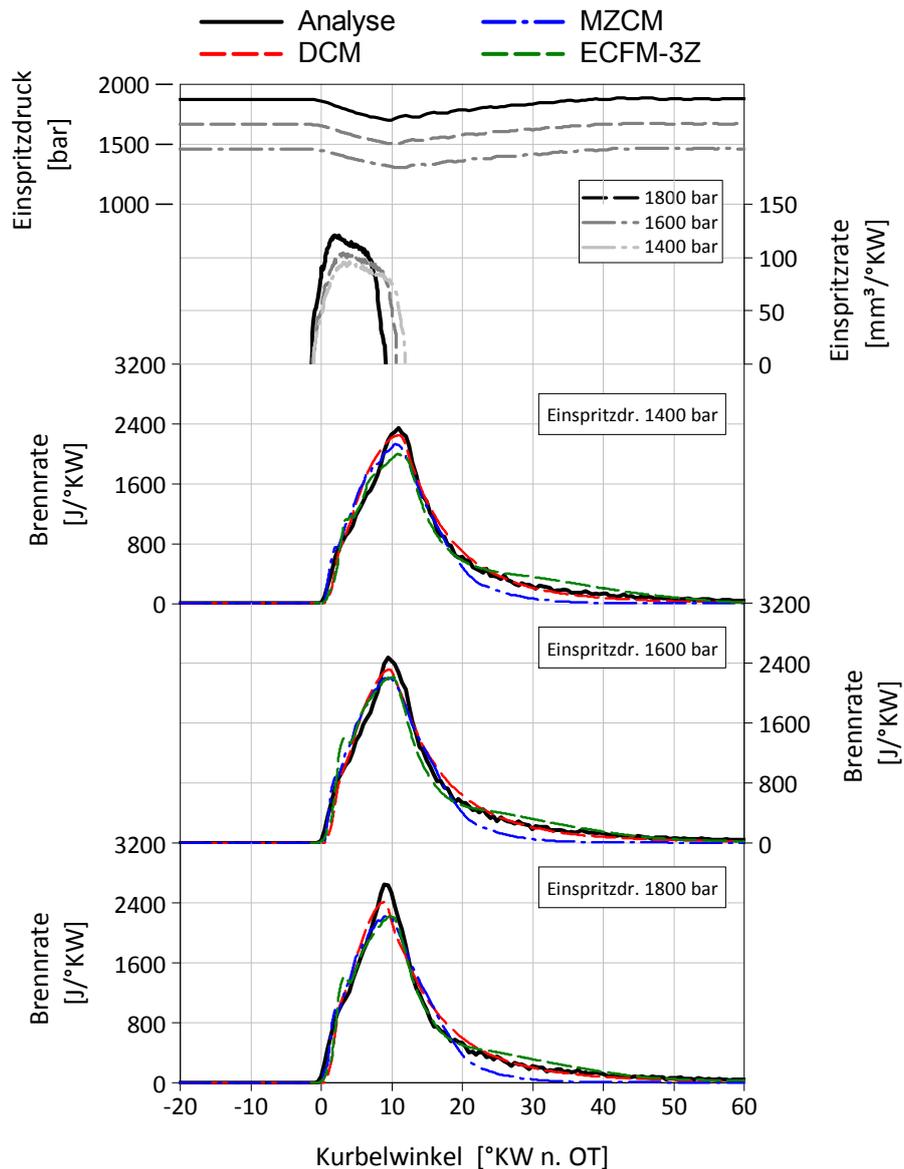


Abbildung 6-12: Variation des Einspritzdrucks für Teillast

Abbildung 6-13 legt die Ergebnisse für Stickoxid und Russ auf Basis der null- und dreidimensionalen Simulation dar. Die größten Abweichungen für Stickoxid sind anhand der Ergebnisse des DCM- und MZCM-Modells erkennbar. Im Falle des MZCM-Modells ist eine zu „hohe“ Temperatur in den Verbrennungszonen der Grund für die stark erhöhte NO-Konzentration. Beim DCM-Modell ist offensichtlich genau das Gegenteil der Fall. Die in der Abbildung erkennbaren Unterschiede für Zündverzögerung und vorgemischte Verbrennung sind ausschlaggebend für etwaige Unterschiede in der NO-Berechnung. Die bessere Übereinstimmung der Brennverläufe mit dem reaktionskinetischen Modell ist der Grund dafür, weshalb eine bessere Korrelation für Stickoxid mit der Messung erreicht wird.

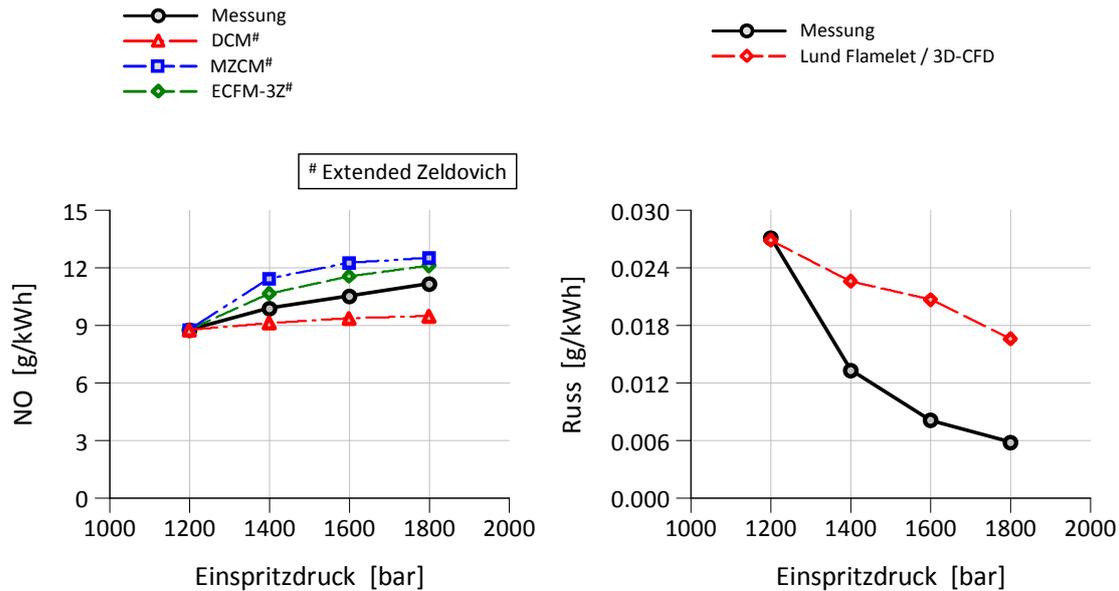


Abbildung 6-13: Stickoxid und Russ bei Variation des Einspritzdrucks in der Teillast

Im Gegensatz zur Qualität der zuvor dargestellten Russergebnisse muss für die Teillastbewertung mit Genauigkeitseinbußen gerechnet werden. Anhand der Ergebnisse ist zwar eine Übereinstimmung des Trends erkennbar, allerdings treten für steigende Einspritzdrücke zunehmende Abweichungen zur Messung auf. Eine Rekalibrierung bzw. Neuabstimmung der Konstanten des Russsmodells wäre in diesem Fall empfehlenswert.

#### 6.2.4 Variation Ladedruck

Für die Motorenentwicklung ist die Anhebung des Ladedruckpotentials des Turboladers essentiell, um Verbrauch und Emissionen weiter zu verbessern. Durch das gesteigerte Druckverhältnis und die gegenüber der einstufigen Turboaufladung erhöhten Aufladewirkungsgrade wird die zweistufige Aufladetechnik auch für Großmotoren immer interessanter. Durch die Anhebung des Luftverhältnisses ist nicht nur eine Reduktion der Rauchzahl möglich, sondern aufgrund der erhöhten Sauerstoffkonzentration eine Erhöhung der Abgasrückführrate erforderlich [13].

- Volllast

Die in Abbildung 6-14 dargestellte Variation des Ladedrucks wurde ohne Abgasrückführung durchgeführt und erfüllt hinsichtlich Stickoxid nur die US EPA TIER2 Emissionsgesetzgebung. Ausgangsbasis war ein Luftverhältnis von 2.0. Dieses wurde durch eine Steigerung des Ladedrucks bis auf einen Endwert von 2.45 erhöht. Der Einspritzdruck betrug 1400 bar, der Restgasanteil wurde konstant gehalten. Weiters wurde die 8-Lochdüse mit 145° Spritzlochwinkel und einem Durchfluss von 4215 cm<sup>3</sup>/30sec eingesetzt.

Für die Variation des Ladedrucks zeigen die eingesetzten Modelle eine hervorragende Übereinstimmung zwischen Analyse und Simulation. Es sei an dieser Stelle noch einmal darauf hingewiesen, dass auch für diese Variation die gleiche Parameterbelegung wie bei der Variation zuvor zum Einsatz gekommen ist. Deutlich werden jedoch Unterschiede in der Ausbrennphase zwischen dem nulldimensionalen DCM-Modell und der Analyse. Hier ist die für das DCM-Modell typische schnellere Ausbrennphase gegenüber MZCM und

ECFM-3Z offensichtlich. Grundsätzlich kann nach vorangegangener Betrachtung für eine Variation des Ladedrucks mit allen drei eingesetzten Simulationsmodellen eine hervorragende Abbildungsgenauigkeit der Brennrate erreicht werden. Die Ergebnisse der Emissionsberechnung für die Ladedruckvariation zeigt Abbildung 6 15.

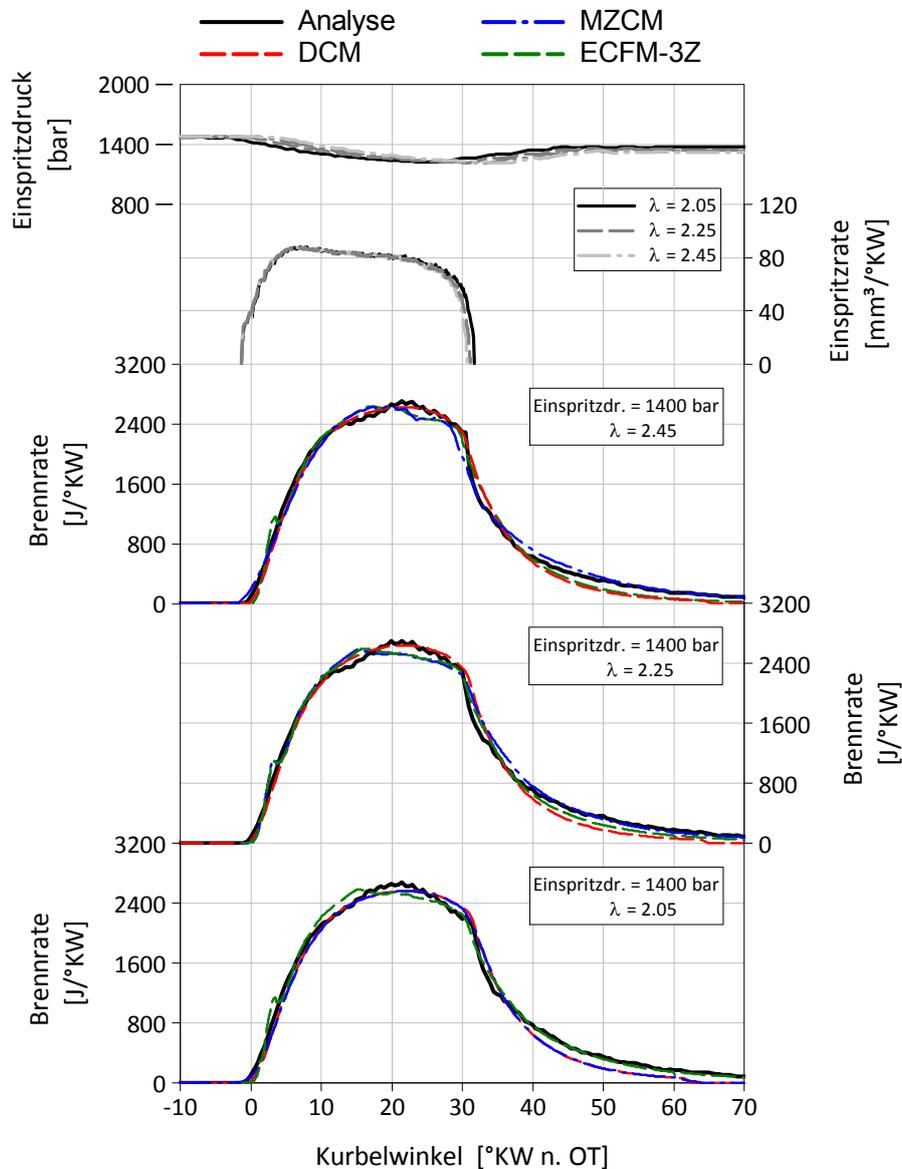


Abbildung 6-14: Variation des Ladedrucks für die Vollast

Als Emissionsgrenzwert wurde am Einzylindermotor ein Stickoxidwert von 7 g/kWh eingestellt. Das resultierende Russemissionsniveau liegt im Bereich von 0.015 g/kWh. Wie der Abbildung entnommen werden kann, zeigt die Simulation eine gute Übereinstimmung mit der Messung für Trend- und Absolutwert. Für den Betriebspunkt mit dem hohen Luftverhältnis von  $\lambda=2.45$  ist allerdings für die Modelle DCM und MZCM ein Unterschied in der Stickoxidkonzentration von 0.45 g/kWh feststellbar, was einer Abweichung von ca. 5% von der Messung entspricht.

Die Berechnung von Russ mit dem in der 3D-CFD Simulation eingesetzten Lund-Modell zeigt hingegen eine hervorragende Übereinstimmung mit der Messung, obgleich Qualität und Genauigkeit der Simulation der Russbildung und -oxidation und damit der resultierenden Russmasse im Abgas extrem schwierig ist. Die berechnete Russmasse

hängt nicht nur von der Qualität der Modellierung der Russbildung und -oxidation ab, sondern auch von der Modellierung der Gemischbildung (also des Kraftstoffstrahles, Tropfenzerfalls und der Tropfenverdampfung sowie der Modellierung der Gasbewegung) und der Modellierungsgüte von Zündung und Verbrennung.

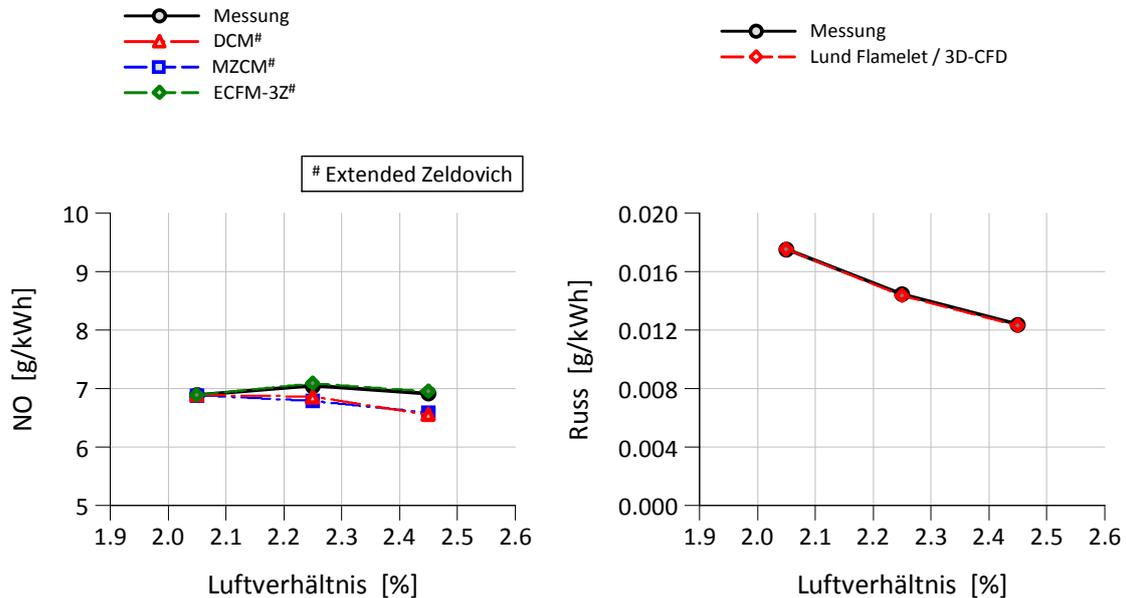


Abbildung 6-15: Ergebnisse für Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Ladedrucks in der Vollast

Aufgrund der hervorragenden Abstimmung der CFD-Modellkette kann im Russmodell auch die Steuerung der Quellterme für Keimbildung, Oberflächenwachstum, Koagulation/Agglomeration und Oxidation mit Standardwerten erfolgen.

- Teillast

Die Teillast wurde anhand eines repräsentativen Betriebspunkts mit 10 bar indiziertem Mitteldruck und einer Motordrehzahl von  $888 \text{ min}^{-1}$  untersucht. Der Ladedruck wurde ausgehend von einem Luftverhältnis von  $\lambda=2.0$  in Intervallen auf einem Endwert von  $\lambda=2.5$  erhöht. Der Einspritzdruck betrug wieder 1400 bar und der Restgasgehalt wurde über die Variation konstant gehalten. Die resultierenden Ergebnisse der Brennratensimulation im Vergleich zur Analyse zeigt nachfolgende Abbildung 6-16.

Anhand der Ergebnisse erkennt man, dass der fixe Parametersatz eine gute Übereinstimmung mit der Analyse liefert. Hier zeigt in erster Linie das DCM-Modell die beste Übereinstimmung. Für die Modelle MZCM und ECFM-3Z sind Abweichungen der Simulation für die Ausbrennphase erkennbar. Eine Verbesserung der Ausbrennphase mit MZCM erfordert allerdings eine Rekalibrierung des Re-Entrainments im Modell.

Das ECFM-3Z Modell veranschaulicht hingegen eine geringe Abweichungen im Absolutniveau und ab ca. 30°KW nach OT eine augenscheinliche Anfachung der Verbrennung in der Ausbrennphase. Diese markante Anfachung der Verbrennung kann auf numerische Stabilitätsprobleme der Simulation zurückgeführt werden. Als Abhilfe wird die Verwendung eines andern Turbulenzmodellierungsmodells, anstatt des  $k-\varepsilon$  Modells empfohlen. Da beim  $k-\varepsilon$  Modell keinerlei geometriebezogene Parameter in die Modellierung eingehen, wie z.B. der dimensionslose Wandabstand  $y^+$ , können sich für die Lösung der Grenzschichtströmung im wandnahen Bereich numerische Schwierigkeiten

ergeben. Alternativ könnte das  $k\text{-}\zeta\text{-}f$  Turbulenzmodell für die CFD-Simulation eingesetzt werden (vgl. auch Abbildung 6-16). Der Vorteil des  $k\text{-}\zeta\text{-}f$ -Modells liegt darin, dass dieses durch Lösung einer eigenen Transportgleichung für den Geschwindigkeitsmaßstab  $\zeta$  eine bessere Formulierung der elliptischen Relaxationsfunktion  $f$  im wandnahen Bereich erlaubt, wodurch die numerische Stabilität verbessert wird [54].

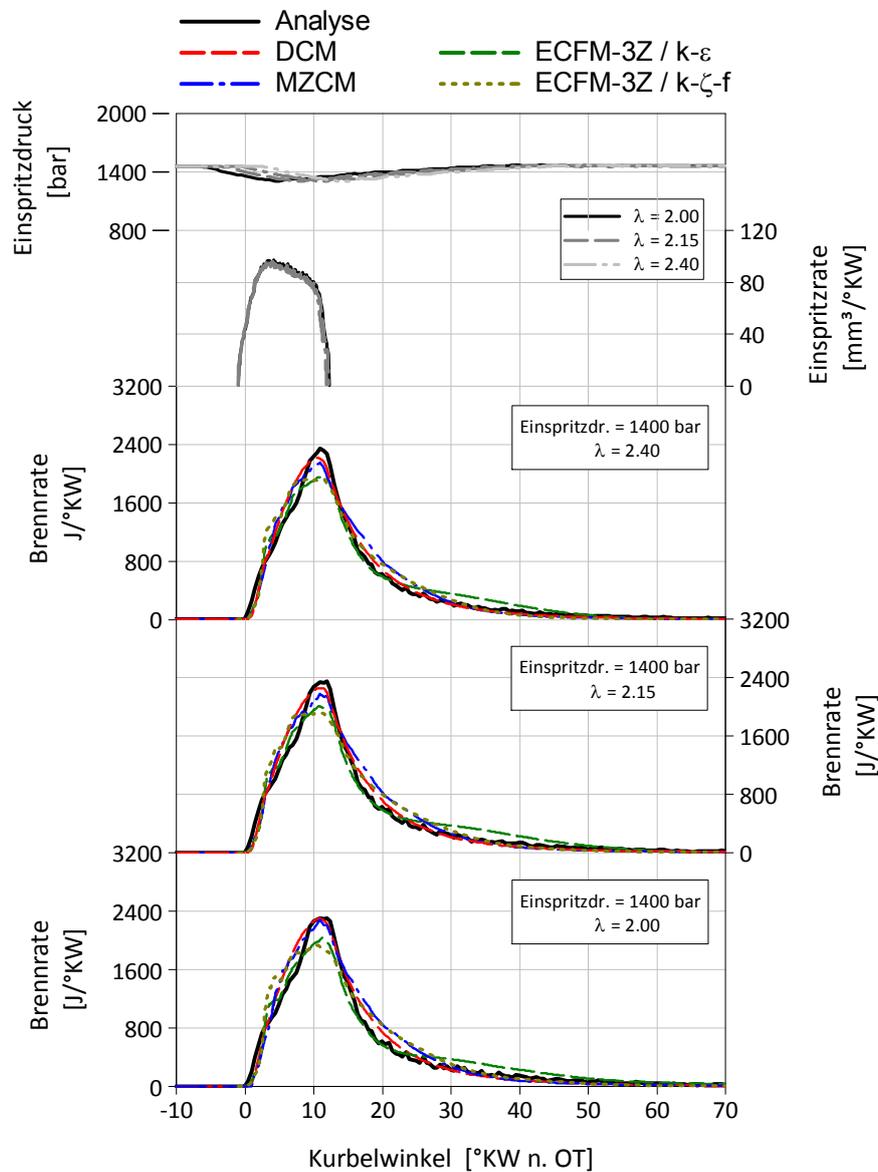


Abbildung 6-16: Variation des Ladedrucks in der Teillast

Aus Abbildung 6-17 sind die Ergebnisse für Stickoxid und Russ von Messung und Simulation ersichtlich. Die auf Basis des DCM-Modells errechnete Stickoxidkonzentration weist im Vergleich zur Messung eine gegenläufige Tendenz auf. Es sieht ganz danach aus, dass in der Teillast das zweizonige DCM-Modell eine zu „kalte“ Verbrennungstemperatur berechnet und damit eine falsche Initialisierung für das Stickoxidmodell bewirkt. Die Ergebnisse auf Basis der Modelle MZCM und ECFM-3Z zeigen einem ähnlichen Trend wie die Messung, allerdings eine zu geringe NO-Konzentration mit steigendem Luftverhältnis.

Die Vorausberechnung von Russ mit dem Lund-Modell trifft den Trend der Messung genau, jedoch ist für steigendes Luftverhältnis eine zu geringe Russkonzentration erkennbar. Insofern kann für diese Variation eine befriedigende Übereinstimmung für die Emissionsberechnung festgestellt werden. Mit Abweichungen von 10% bei Stickoxid und über 20% bei Russ ist aber für die Teillast zu rechnen.

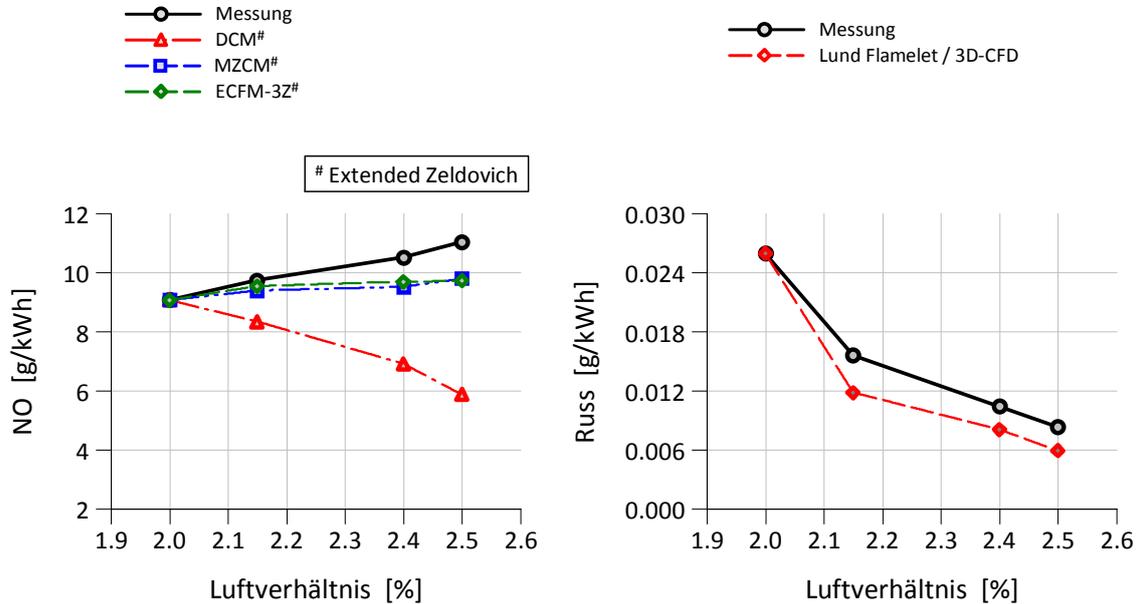


Abbildung 6-17: Ergebnisse für Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Ladedrucks in der Teillast

### 6.2.5 Variation Brennbeginn

Der richtige Zeitpunkt des Brennbeginns ist entscheidend zur Ausreizung des Spitzendruckpotentials und zur Erreichung des bestmöglichen Wirkungsgrads des Motors. Die richtige Schwerpunktslage der Verbrennung ist demnach ausschlaggebend für einen hohen Wirkungsgrad und minimalen Kraftstoffverbrauch. Zu frühe Schwerpunktslagen erhöhen die Wandwärmeverluste und verschlechtern nicht nur den Wirkungsgrad, sondern bewirken aufgrund der hohen Temperaturen auch eine Maximierung thermischen Stickoxids. Die Ermittlung des bestmöglichen Brennbeginns ist demnach eine Optimierungsaufgabe und lässt sich relativ einfach am Motorprüfstand ermitteln.

- Volllast

Anhand der in Abbildung 6-18 dargestellten Timingvariation für den Volllastpunkt mit 24 bar indiziertem Mitteldruck und einer Motordrehzahl von  $1050 \text{ min}^{-1}$  sind auszugsweise Ergebnisse für Analyse und Simulation dargestellt. Der Variation wurde ein Einspritzdruck von 1400 bar zu Grunde gelegt sowie konstanter Lade- und Gegendruck am Motorprüfstand eingestellt. Die zur Berechnung der Energieumsetzung benötigten Einspritzraten wurden im Vorfeld am Einspritzpumpenprüfstand bestimmt. Das Einspritztiming wurde in Schritten von jeweils  $2^\circ\text{KW}$  von früh nach spät variiert und die bewährte 8-Loch Einspritzdüse mit  $145^\circ$  Spritzlochwinkel eingesetzt.

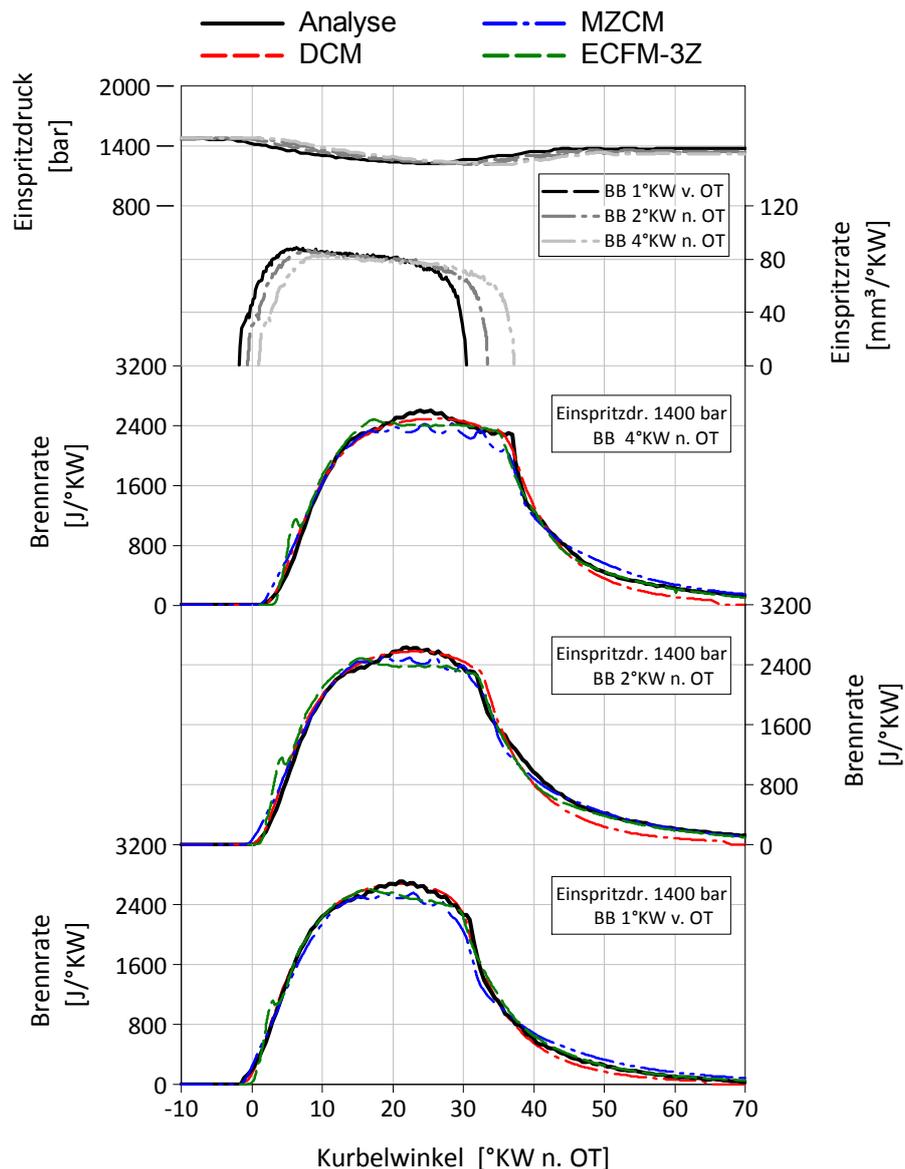


Abbildung 6-18: Variation des Brennbeginns für die Vollast

Für die Timingvariation lässt sich eine hervorragende Übereinstimmung zwischen Analyse und Simulation feststellen, womit eine hohe allgemeine Gültigkeit der in den Simulationsmodellen eingesetzten Parameterbelegung gegeben ist. Augenscheinliches Manko ist auch bei dieser Variation die Abbildung der Ausbrennphase mit dem DCM-Modell. Die Verbrennungsmodelle MZCM und ECFM-3Z bilden hingegen Diffusionsverbrennung und Ausbrennphase für diese Parametervariation ausgezeichnet ab. Eine evidente geringe Abweichung tritt bei Brennbeginn und Vormischanteil beim ECFM-3Z Modell auf. Diese Unterschiede können durch eine Korrektur des Spritzbeginns oder durch Neuabstimmen der Zündverzugskonstante an die Analyse angepasst werden. Auch das MZCM-Modell zeigt eine Differenz zwischen Analyse und Simulation und erfordert für eine höhere Genauigkeit eine Neuabstimmung des Zündmodells.

Auf Basis der Brennraten simulation zeigt Abbildung 6-19 die Ergebnisse für Stickoxid und Russ. Um die Korrelation der Emissionsmodelle mit der Messung für eine Variation des Brennbeginns besser beurteilen zu können, wurden die Modelle auf den frühesten Brennbeginn kalibriert.

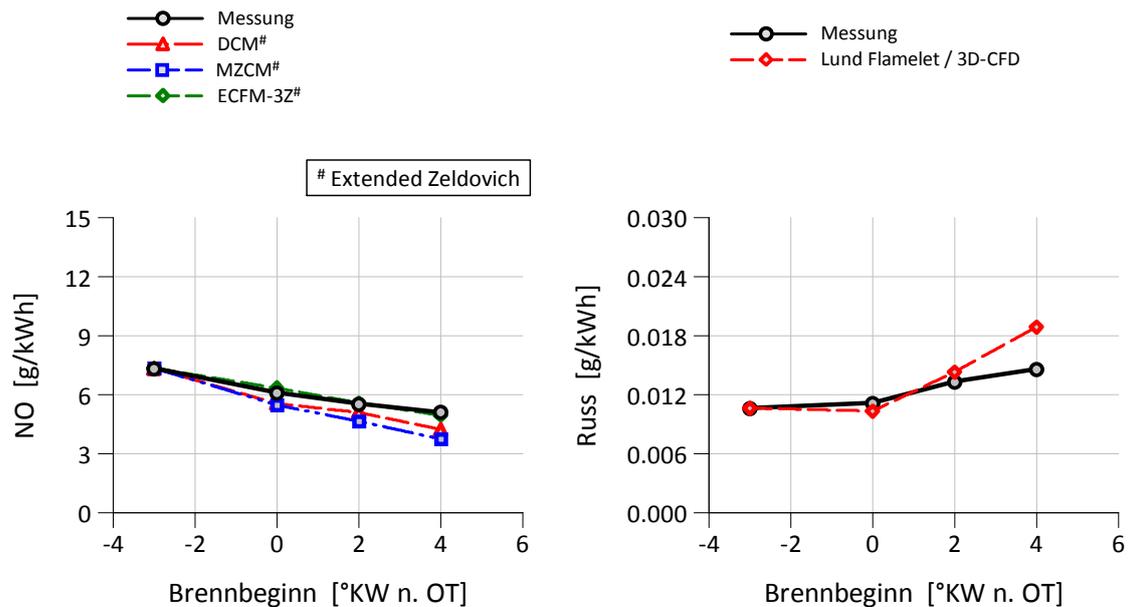


Abbildung 6-19: Ergebnisse für Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Brennbeginns in der Vollast

Generell zeigt der dargestellte Vergleich zwischen Rechnung und Messung eine Übereinstimmung des Trends für Stickoxid und Russ. Obwohl eine geringe Abweichung im Brennbeginn bei der Simulation mit ECFM-3Z feststellbar ist, kann Stickoxid exakt prognostiziert werden. Die berechneten Stickoxidkonzentrationen auf Basis der Brennratenmodelle DCM und MZCM sind nahezu identisch, wenngleich für spätere Brennbeginne Abweichungen von mehr als 20% zur Messung auftreten. Die Berechnung von Russ zeigt im Fall der untersuchten Timingvariation eine hervorragende Übereinstimmung des Trends und auch der Absolutwerte. Nur für den späten Brennbeginn ist eine Abweichung zur Messung feststellbar. Diese liegt jedoch unter 30%.

- Teillast

Für die Teillast wurde anhand einer Einspritzzeitpunktsvariation die Auswirkung auf Verbrennung, Stickoxid- und Russkonzentration erforscht. Die Untersuchungen am Motorenprüfstand erfolgten wieder mit einem konstanten Einspritzdruck von 1400 bar. Indizierter Mitteldruck, Drehzahl und Modellparameter sind gleich zu den bereits vorgestellten Variationen, eine individuelle Anpassung wurde nicht durchgeführt. Abbildung 6-20 zeigt die Simulationsergebnisse der Brennratensimulation.

In erster Linie sind wieder Unterschiede in der Ausbrennphase bei DCM und MZCM erkennbar. Das ECFM-3Z Modell weist wie bei den Variationen zuvor Abweichungen im Absolutniveau der Brennrate und eine verschleppte Ausbrennphase im Vergleich zur Analyse auf. Eine Verbesserung der Ausbrennphase mit MZCM kann wiederum nur über eine Rekalibrierung der Reentrainment-Konstante erfolgen. Zur Verbesserung der Übereinstimmung zwischen Analyse und DCM müsste hingegen eine totale Neuabstimmung der Modellparameter durchgeführt werden.

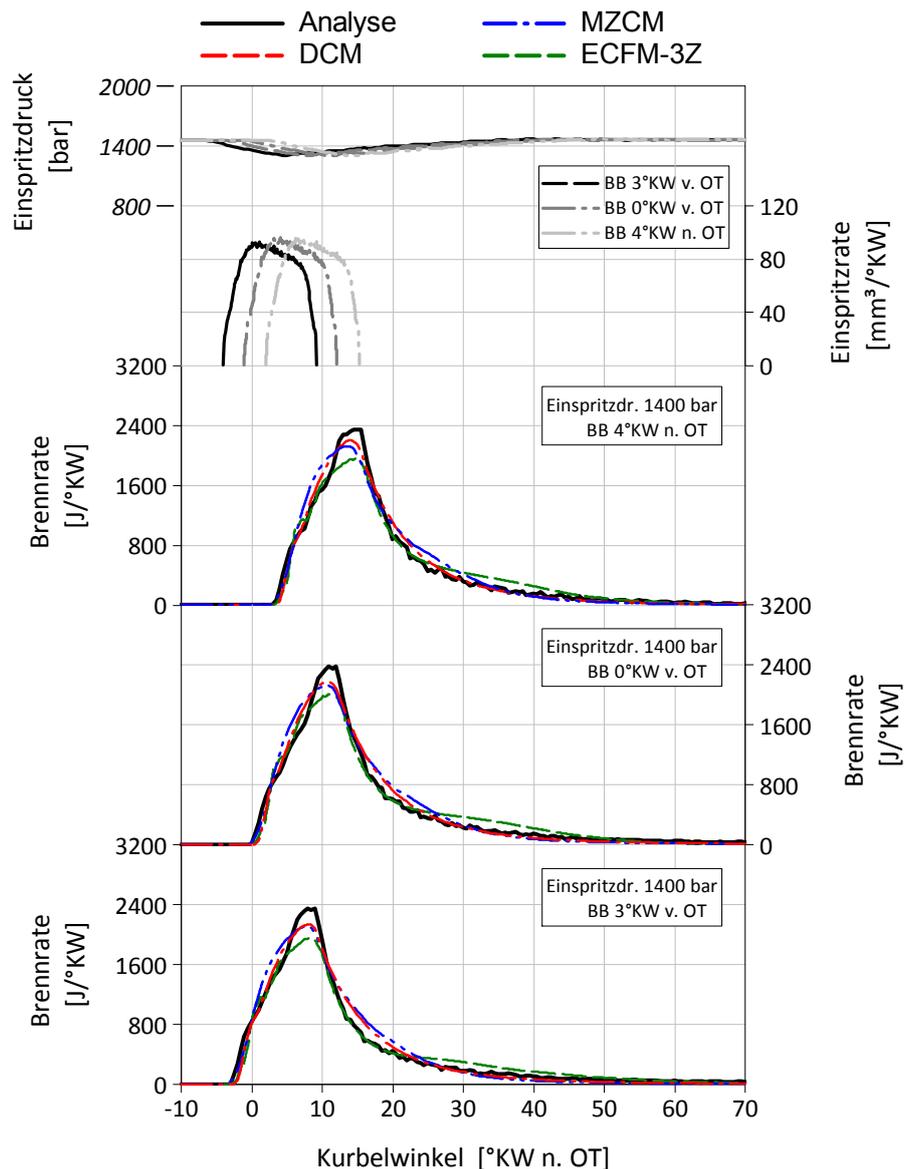


Abbildung 6-20: Variation des Brennbeginns in der Teillast

Die Simulationsergebnisse für Stickoxid- und Russberechnung zeigt Abbildung 6-21. Sowohl für die 0D/1D als auch die 3D-CFD Rechnung wurde das erweiterte Zeldovich-Modell für Stickoxid und das Lund-Modell für die Berechnung von Russ eingesetzt. Wie die Simulationsergebnisse bestätigen, war es möglich, Stickoxid mit dem Zeldovich-Modell mit einer Genauigkeit von  $\pm 10\%$  zu prognostizieren. Voraussetzung dafür ist eine entsprechend genaue Abbildung der Energieumsetzung durch die Verbrennungsmodelle. Anhand des Vergleichs der Ergebnisse für das MZCM-Modell ist zwar eine ansprechende Übereinstimmung der Brennraten zwischen Simulation und Analyse gegeben, jedoch tritt für die Variation eine Unterbewertung von Stickoxid auf.

Hinsichtlich der Ergebnisse ist festzuhalten, dass die Modellkette, vor allem aber der Einspritzratenverlauf eine wichtige Rolle bei der Abbildungsgenauigkeit der Brennraten spielt. Unterschiede in der zu erwartenden NO-Emission, die ja über die Temperatur in der verbrannten Zone eng an den Brennratenverlauf gebunden sind, sind dadurch erklärbar.

Die Situation bei der Russemission ist für die untersuchte Variation wenig befriedigend. Im vorliegenden Fall wird zwar die Tendenz richtig vorhergesagt, es ergeben sich jedoch Unterschiede im Absolutwert von bis zu 50%.

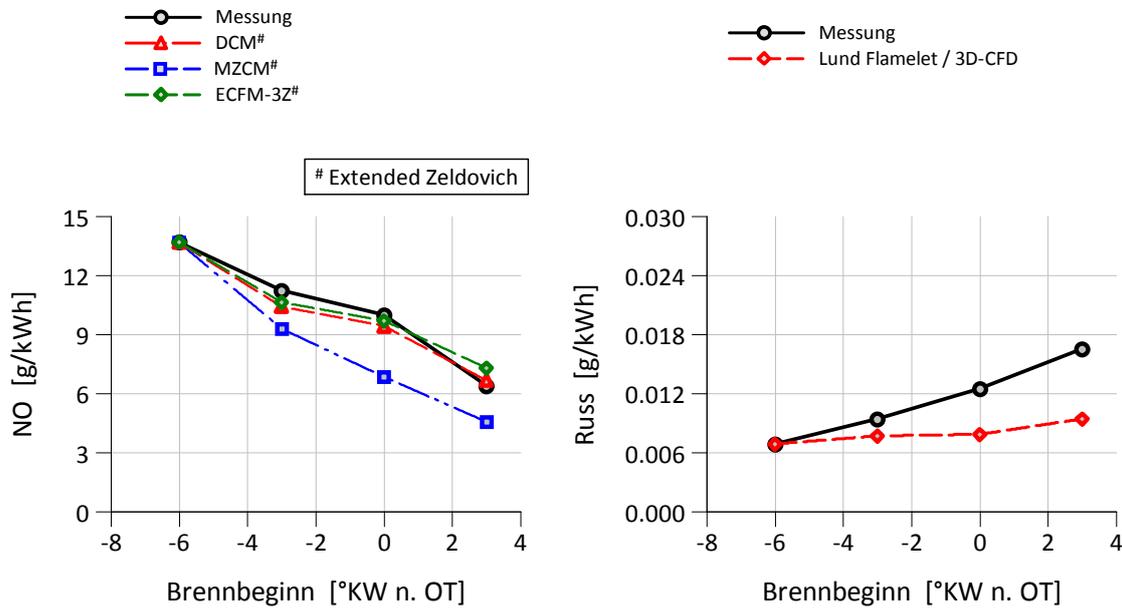


Abbildung 6-21: Ergebnisse für Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Brennbegins in der Teillast

Allgemein lässt sich sagen, dass die Simulation von Russ nach wie vor schwierig ist und eine Herausforderung darstellt. Insofern sind auch zukünftig vermehrte Entwicklungsanstrengungen bei der Modellentwicklung notwendig, um eine zielsichere Prognose für Russ abgeben zu können.

### 6.2.6 Variation Einspritzdruck mit konstanter AGR-Rate

Zur weiteren Senkung des Stickoxidniveaus wurde eine kombinierte Variation aus Einspritzdruck und AGR mit der Simulation und am Prüfstand untersucht. Zur Beurteilung des Potentials wurde der Einspritzdruck kontinuierlich von 1200 bar auf 1800 bar gesteigert. Die AGR-Rate wurde dabei auf einen fixen Wert eingestellt und konstant gehalten. Ziel der Untersuchung war die Erreichung eines NO<sub>x</sub>-Grenzwerts von 2 g/kWh, welcher die aktuelle IMO Gesetzgebung für Schiffsanwendungen repräsentiert.

- Volllast

Die Beurteilung der Ergebnisqualität der unterschiedlichen Brennratenmodelle wurde zunächst anhand einer Einspritzdruckvariation mit konstanter AGR-Rate für den Volllastpunkt (IMEP=24 bar, Speed=1050 min<sup>-1</sup>) durchgeführt. Für die Brennraten- und Emissionsmodelle wurde der gleiche Parametersatz wie bei den Variationen zuvor eingesetzt, und die Modellkonstanten für die übrigen Einspritzdrücke nicht mehr verändert. Die Simulationsergebnisse der eingesetzten Verbrennungsmodelle zeigt Abbildung 6-22.

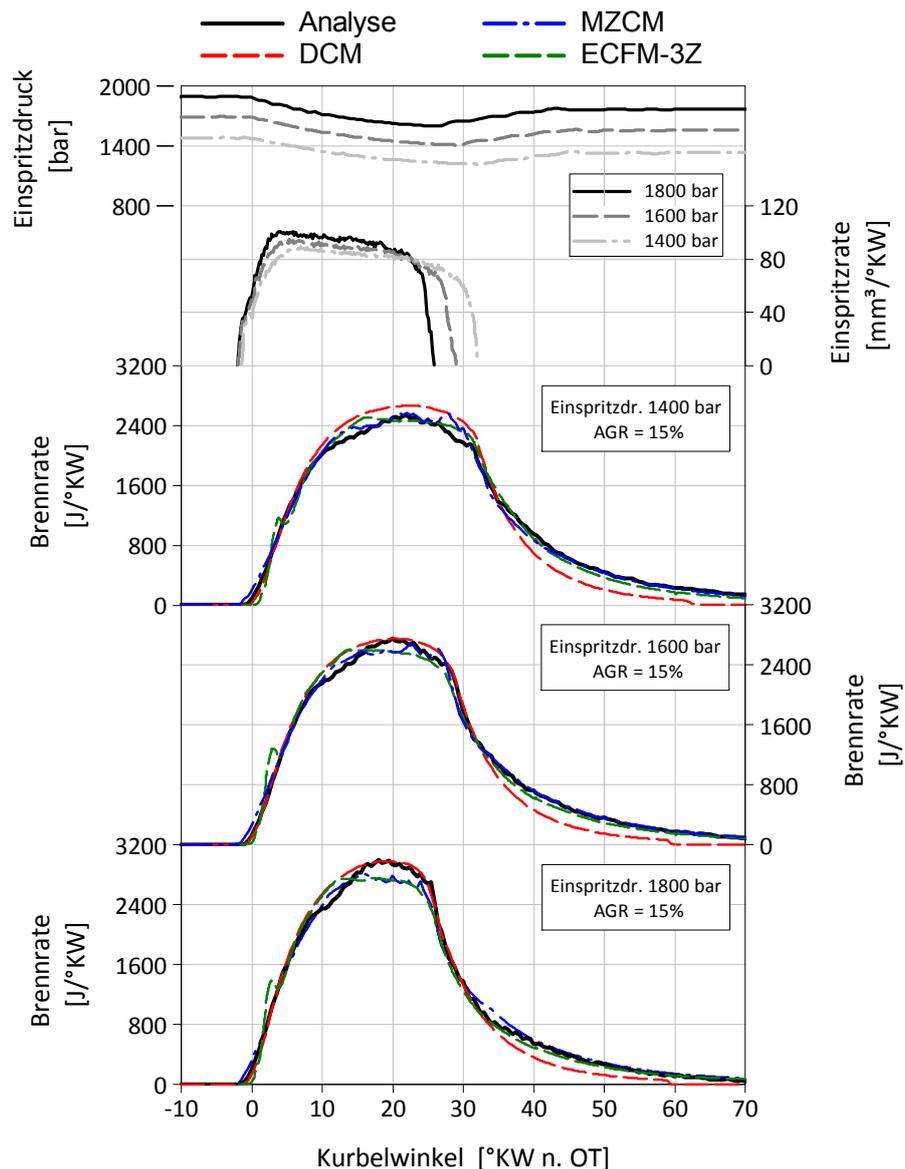


Abbildung 6-22: Variation Einspritzdruck mit konstanter AGR-Rate, Volllast

Die Ergebnisse zeigen für die Verbrennungsmodelle MZCM und ECFM-3Z eine hervorragende Übereinstimmung für die Flanken der Brennrate mit der Analyse, jedoch Abweichungen im Absolutniveau beim Punkt mit 1800 bar Einspritzdruck. Mit dem DCM-Modell berechnete Brennverläufe unterscheiden sich in der Ausbrennphase der Verbrennung. Das Absolutniveau der Brennrate wird im Vergleich zur Analyse sehr gut abgebildet. Beim niedrigen Einspritzdruck (1400 bar) zeigt das DCM-Modell allerdings wieder einen verringerten Einfluss von AGR auf die Simulation der Brennrate.

Abbildung 6-23 veranschaulicht die Simulationsergebnisse der Einspritzdruckvariation mit AGR hinsichtlich Stickoxid- und Russ. Sowohl für die 0D/1D als auch für die 3D-CFD Rechnung kam als NO<sub>x</sub>-Modell wieder das erweiterte Zeldovich-Modell zur Anwendung. Als Emissionsmodell für die Russberechnung wurde wieder das reaktionskinetische Lund-Modell angewandt.

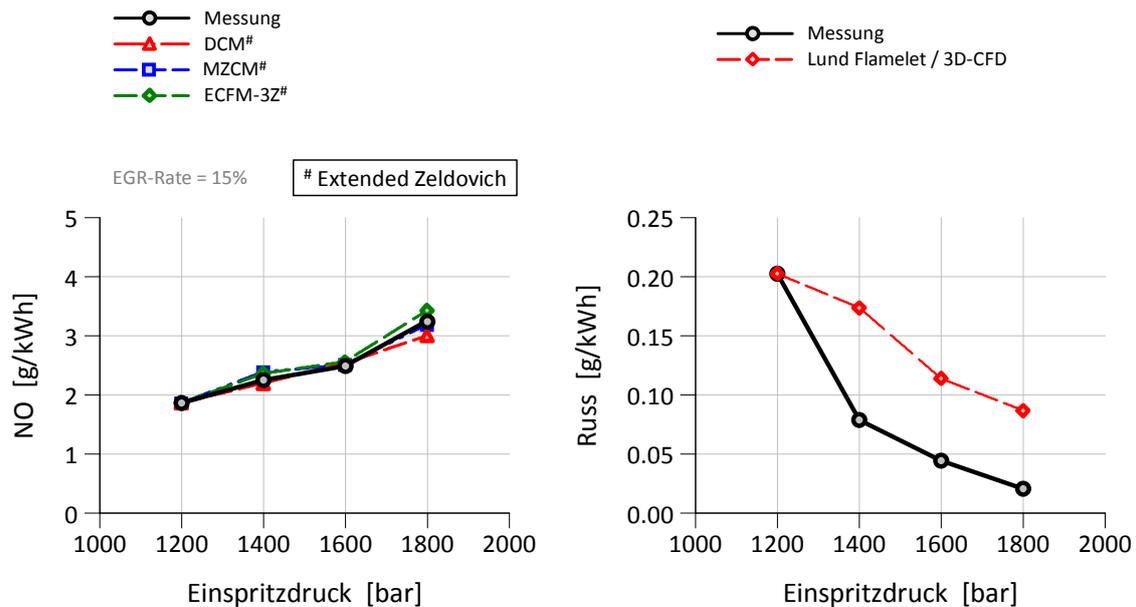


Abbildung 6-23: Ergebnisse für Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Einspritzdrucks mit konstanter AGR-Rate, Volllast

Wie aus der Abbildung ersichtlich, konnten die Stickoxide mit dem Zeldovich-Modell bei einer Variation des Einspritzdrucks (1200 bis 1800 bar) mit AGR im Volllastpunkt mit einer Genauigkeit von  $\pm 10\%$  vorausberechnet werden. Voraussetzung dafür ist eine entsprechend genaue Abbildung der Energieumsetzung durch die Verbrennungsmodelle wie im vorliegenden Fall. Die Ergebnisse der Russberechnung untermauern die Aussage, dass Russ meistens nur tendenziell vorausberechnet werden kann.

- Teillast

Abbildung 6-24 stellt die Ergebnisse der Brennratensimulation für eine Variation des Einspritzdrucks mit konstanter AGR-Rate für den Teillastpunkt dar. Anhand der Ergebnisse lässt sich auch für den Teillastpunkt eine gute Übereinstimmung der Brennraten mit der Analyse für verschiedene Einspritzdrücke mit konstanter AGR-Rate feststellen. Bemerkenswert in diesem Zusammenhang ist die Tatsache, dass kein weiterer Kalibriervorgang erfolgte, sondern alle Berechnungen ohne Anpassung mit exakt den gleichen Modellparametern wie beim Volllastpunkt durchgeführt wurden.

Geringe Abweichungen hinsichtlich Brennbeginn, maximaler Umsetzrate und Ausbrennphase sind allerdings bei allen Verbrennungsmodellen feststellbar. Beispielweise wird mit dem ECFM-3Z Modell der Vormischanteil der Dieselverbrennung für die gesamte Variation überrepräsentiert. Die Abweichung in den Vormischanteilen zwischen Simulation und Analyse können in weiterer Folge die Emissionsberechnung beeinflussen.

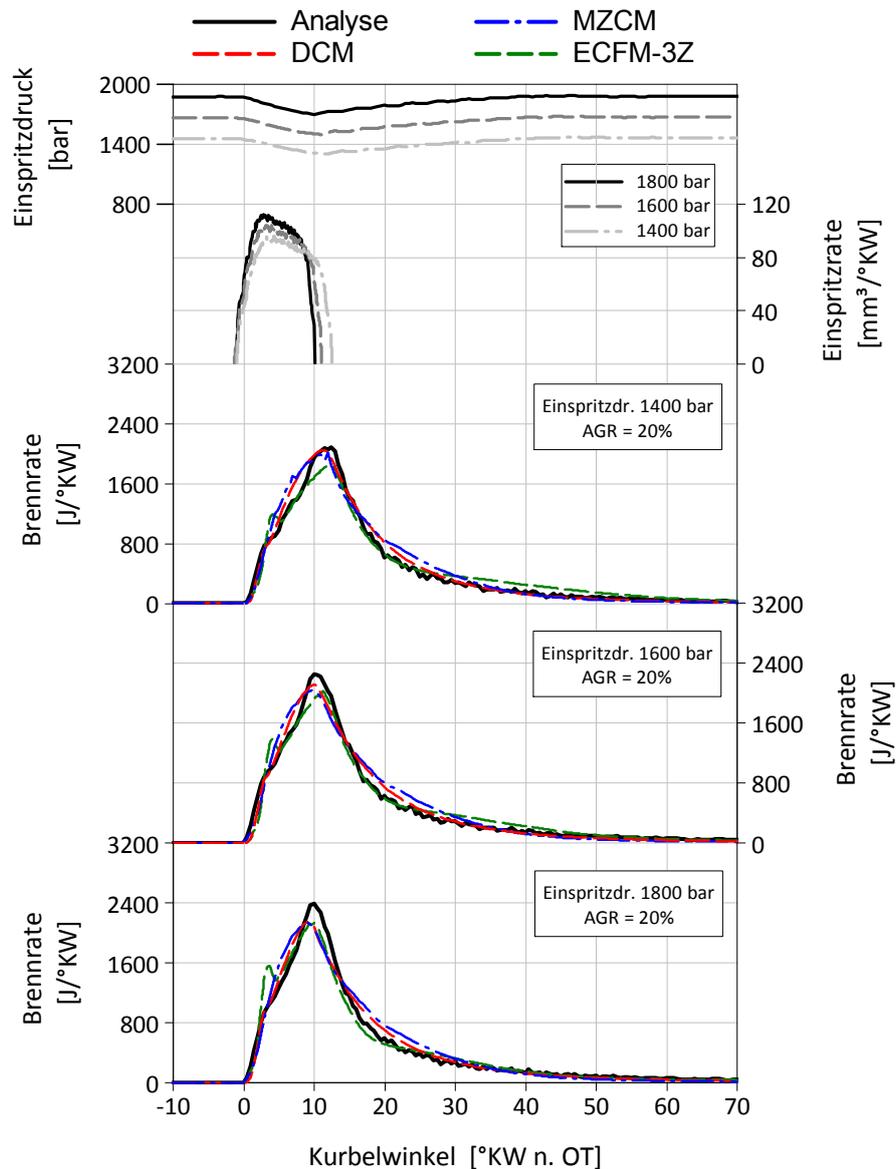


Abbildung 6-24: Variation Einspritzdruck mit konstanter AGR-Rate, Teillast

Abbildung 6-25 erläutert die Ergebnisse der Emissionsberechnung für Stickoxid und Russ für die Teillast und einer zu Grunde gelegten AGR-Rate von 20%. Aufgrund der guten Übereinstimmung mit der Messung ist auch für die Teillast eine genaue Berechnung von Stickoxid möglich, wenngleich auch beim Betriebspunkt mit 1800 bar Einspritzdruck Abweichungen für die 3D-CFD Simulation erkennbar sind. Die Simulationsergebnisse zeigen deutlich, dass vor allem die Variationen Einspritzdruck und AGR die größten Probleme für die Simulation von Russ aufweisen. Für die Variation von Einspritzdruck mit AGR ist ebenfalls nur eine Übereinstimmung des Trends für Russ feststellbar. Die jeweilige Halbierung der Russemissionswerte bei einer Steigerung des Einspritzdrucks um 200 bar kann mit dem Russmodell nicht wiedergegeben werden.

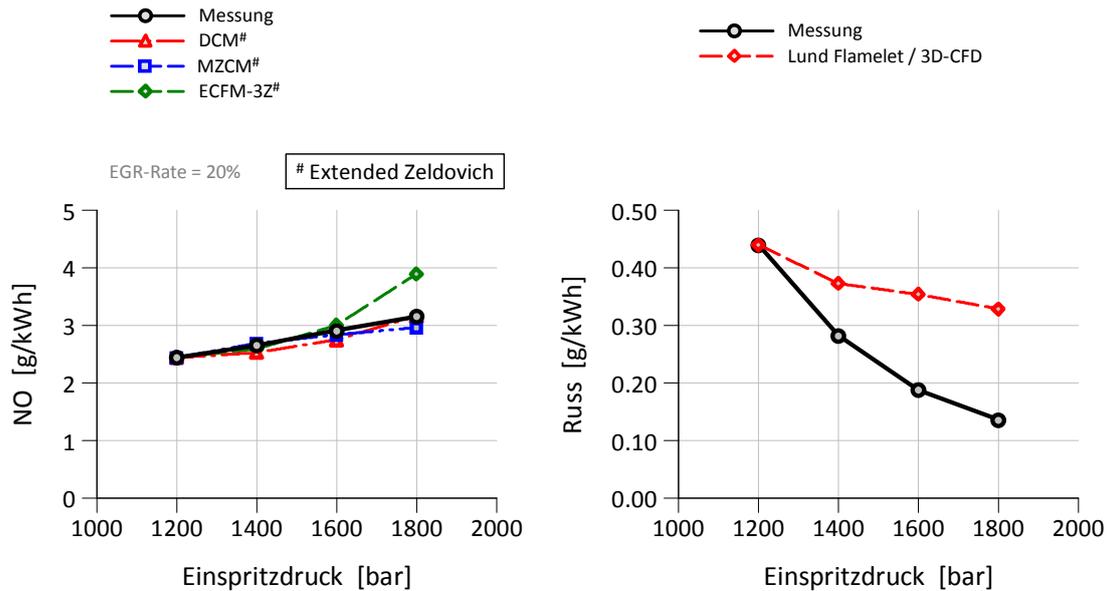


Abbildung 6-25: Ergebnisse für Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Einspritzdrucks mit konstanter AGR-Rate, Teillast

### 6.2.7 Variation Hubvolumen

Anhand der Variation des Hubvolumens soll untersucht werden, ob mit dem fixierten Modellparametersatz eine Vorausrechnung der Verbrennung für einen anderen Motor möglich ist. Bei dem untersuchten Motor handelt es sich um einen typischen Schnellläufer, welcher vorwiegend in Schiffen oder für die Stromerzeugung eingesetzt wird. Nachfolgende Tabelle 6-2 zeigt die Kenndaten des untersuchten Motors.

Bohrung x Hub	190 x 220 mm
Hubvolumen	6.2 dm <sup>3</sup>
Arbeitsprozess	4-Takt
Verdichtungsverhältnis	17.5:1
Einspritzsystem	BOSCH Common Rail
Eff. Leistung SCE (Single Cylinder Engine)	155 kW bei 1500 min <sup>-1</sup>
Applicationen MCE (Multi Cylinder Engine)	Lokomotive, Marine, EPG

Tabelle 6-2: Kenndaten des untersuchten Motors

Für die CFD-Simulation wurde ein neues Berechnungsnetz erstellt und das Steuerfile des Mittelschnellläufers mit identischen Einstellungen für Einspritzung und Verbrennung übernommen. In der 0D/1D Simulation wurden nur motorspezifische Veränderungen im Zylindermodul vorgenommen. Zur Überprüfung der Übertragbarkeit der Modellparameter des Mittelschnellläufers wurden Simulationen für ausgewählte Betriebspunkte des Schnellläufers durchgeführt.

Der Vollastpunkt weist einem indizierten Mitteldruck von 24 bar und eine Nenndrehzahl von 1500 min<sup>-1</sup> auf, beim Teillastpunkt beträgt der Mitteldruck 9 bar und die Drehzahl 1300 min<sup>-1</sup>. Um genaueste Ansprüche von Seiten der Simulation zu erfüllen, wurden

vermessene Einspritzraten eingesetzt. Die Ergebnisse der Brennratensimulation zeigt Abbildung 6-26. Im oberen Bildteil sind die verwendeten Einspritzraten, im unteren Bildteil die simulierten Brennraten vergleichend mit der Analyse dargestellt.

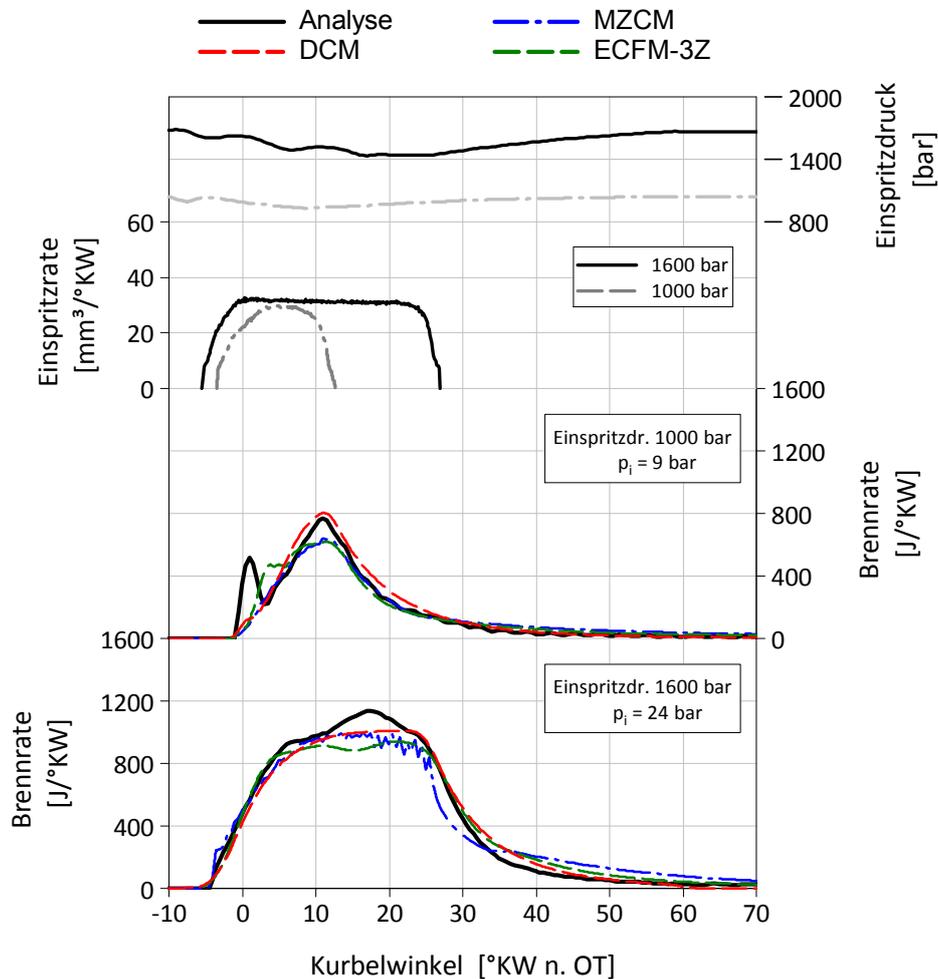


Abbildung 6-26: Vergleich der Brennraten des Schnellläufers für Voll- und Teillast

Zündverzug sowie an- und absteigende Flanken der Brenngesetze werden qualitativ gut abgebildet. Abweichungen treten im Bereich der maximalen Umsatzrate und gegen Ende der Verbrennung in der Ausbrandphase auf. Markant ist der rasche Abfall der Brennrate beim MZCM-Modell gegen Ende der Diffusionsverbrennung.

Für den Teillastpunkt ist ebenfalls eine Übereinstimmung für Zündverzug und die Flanken der Brennraten gegeben. Augenscheinlich ist die mangelhafte Abbildung der vorgemischten Verbrennung. Eine Verbesserung der Abbildungsgenauigkeit erfordert daher eine Rekalibrierung der Modellparameter. Dennoch ist eine begrenzte Übertragbarkeit der Modellkonstanten auf andere Motoren möglich.

### 6.3 Abschließende Modellbewertung

Die Bewertung der Simulation zur Modellierung von Verbrennung und Schadstoffbildung wird in diesem Abschnitt auf Basis der mittleren Abweichung durchgeführt. Die Grundlage bilden Variationen für Brennbeginn, Ladedruck, Einspritzdruck und Abgasrückführung für Voll- und Teillast. Weiters wurden zwei kombinierte Variationen in die Bewertung mit aufgenommen.

Für eine generelle Beurteilung der Simulationsmodelle wird die mittlere Abweichung der Simulationsergebnisse von den Messwerten - bezogen auf die Anzahl der untersuchten Betriebspunkte - auf Basis von Gleichung (6-2) als Maß herangezogen.

$$Abw.Variation = \frac{1}{n} \cdot \left( \sum_{i=1}^n \left| \frac{Ergebnis_{Simulation} - Ergebnis_{Messung}}{Ergebnis_{Messung}} \right| \right) \cdot 100 \text{ [%]} \quad (6-2)$$

Die Berechnung der Abweichung der kompletten Datenbasis erfolgt auf Basis der mittleren Abweichungen der Variationen bezogen auf die Anzahl der untersuchten Parameter nach Gleichung (6-3). Die in der Arbeit untersuchten Betriebspunkte erlauben sowohl eine getrennte Bewertung für Voll- als auch Teillast sowie eine Gesamtbewertung der Datenbasis.

$$Abw.Datenbasis = \frac{1}{m} \cdot \left( \sum_{j=1}^m Abw.Variation \text{ [%]} \right) \quad (6-3)$$

Basis für die Bewertung stellen die in der Arbeit eingesetzten null- und dreidimensionalen Simulationsmodelle dar. Für die Bewertung der Verbrennung wurde die prozentuale Abweichung des indizierten Mitteldrucks der Modelle DCM, MZCM und ECFM-3Z herangezogen. In die Bewertung wurden auch die eingesetzten Emissionsmodelle aufgenommen, wie das erweiterte Zeldovich-Modell für Stickoxid und das Lund-Modell für Russ. Tabelle 6-3 dokumentiert für den Volllastpunkt die mittlere Abweichung der untersuchten Parametervariationen und deren Gesamtbewertung.

Variation	IMEP			NO <sub>x</sub>			Russ
	DCM	MZCM	ECFM	Zeld./DCM	Zeld./MZCM	Zeld./ECFM	Lund/CFD
SOI	0,6%	1,6%	1,6%	5,7%	13,9%	1,1%	30,9%
Ladedruck (λ)	1,3%	1,8%	3,0%	2,6%	2,8%	0,5%	5,2%
Einspritzdruck	0,9%	1,8%	2,6%	3,7%	10,8%	4,0%	16,2%
AGR	1,0%	4,3%	3,5%	11,9%	9,7%	0,9%	52,1%
ED (+AGR)	1,8%	1,5%	2,5%	3,0%	2,1%	3,8%	150,1%
Drall (+AGR)	1,1%	1,4%	2,1%	36,1%	31,5%	7,8%	20,9%
<b>Mittlere Abw.</b>	<b>1,1%</b>	<b>2,1%</b>	<b>2,6%</b>	<b>10,5%</b>	<b>11,8%</b>	<b>3,0%</b>	<b>45,9%</b>

Tabelle 6-3: Bewertung von Simulationsmodellen für die Volllast

Laut Tabelle 6-3 tritt die größte Abweichung in der Stickoxidberechnung vor allem für die Variation von Drall mit AGR auf. Grund dafür ist die verminderte Reaktion von nulldimensionalen Modellen auf die Wirkung von AGR und Ladungsbewegung. Die geringste mittlere Abweichung für Stickoxid zeigt allerdings die 3D-CFD Simulation. Bei der Berechnung von Russ stellt die kombinierte Variation aus Einspritzdruck und AGR das größte Problem für das eingesetzte Lund-Modell dar.

Tabelle 6-4 zeigt die Bewertungsergebnisse der mittleren Abweichung des Teillastpunkts. Auch für die Teillast wurde wieder die mittlere Abweichung für Mitteldruck, Stickoxid und Russ berechnet.

Variation	IMEP			NO <sub>x</sub>			Russ
	DCM	MZCM	ECFM	Zeld./DCM	Zeld./MZCM	Zeld./ECFM	Lund/CFD
SOI	3,2%	2,4%	1,5%	4,3%	19,4%	5,6%	50,3%
Ladedruck ( $\lambda$ )	4,5%	3,0%	0,5%	23,9%	6,1%	5,5%	19,0%
Einspritzdruck	1,9%	2,4%	0,3%	8,5%	2,7%	6,5%	102,3%
AGR	4,2%	3,6%	2,6%	17,0%	15,7%	12,8%	35,3%
ED (+AGR)	5,4%	4,9%	0,4%	2,6%	2,4%	7,3%	65,8%
Drall (+AGR)	1,8%	2,0%	1,9%	50,7%	44,7%	12,6%	26,6%
<b>Mittlere Abw.</b>	<b>3,5%</b>	<b>3,1%</b>	<b>1,2%</b>	<b>17,8%</b>	<b>15,2%</b>	<b>8,4%</b>	<b>49,9%</b>

Tabelle 6-4: Bewertung von Simulationsmodellen für die Teillast

Im Vergleich zur Volllast belegen die Ergebnisse der Teillast eine höhere mittlere Abweichung für Mitteldruck und Stickoxid. Vor allem die Abweichungen für Russ sind für den Teillastbereich wesentlich stärker ausgeprägt. Es fällt auf, dass die mittlere Abweichung der Datenbasis für das ECFM-3Z Modell für Mitteldruck und Stickoxid am geringsten ist. Auch in der Teillast ist das markante Problem nulldimensionaler Modelle für eine Variation des Zylinderdralls offensichtlich.

Abschließend zeigt Tabelle 6-5 noch die mittlere Abweichung der gesamten Datenbasis anhand zuvor beschriebener Ergebnisse für Voll- und Teillast.

Variation	IMEP			NO <sub>x</sub>			Russ
	DCM	MZCM	ECFM	Zeld./DCM	Zeld./MZCM	Zeld./ECFM	Lund/CFD
Volllast	1,1%	2,1%	2,6%	10,5%	11,8%	3,0%	45,9%
Teillast	3,5%	3,1%	1,2%	17,8%	15,2%	8,4%	49,9%
<b>Mittlere Abw.</b>	<b>2,3%</b>	<b>2,6%</b>	<b>1,9%</b>	<b>14,2%</b>	<b>13,5%</b>	<b>5,7%</b>	<b>47,9%</b>

Tabelle 6-5: Mittlere Abweichung der gesamten Datenbasis

Abschließend lässt sich sagen, dass eine Vorausrechnung von Verbrennung und Stickoxid mit der 3D-CFD Simulation möglich ist. Kritisch zu betrachten ist nach wie vor die Wirkung von AGR und Ladungsbewegung auf nulldimensionale Brennratenmodelle und die Prognose von Russ.

- Modellbewertung mit konstantem äußeren NO-Kalibrierfaktor

Zum Schluss des Kapitels soll die Eignung der Simulation zur Vorausberechnung von Stickoxid mit einem einheitlichen äußeren Kalibrierfaktor überprüft werden. Die für den Vergleich verwendeten Parametervariationen entsprechen den Variationen nach Kapitel 6.2. Um einen fairen Vergleich zwischen OD- und 3D-Modellen zu gewährleisten, wurde die Beurteilung der Variation Drall nicht in die Bewertung mitaufgenommen.

Abbildung 6-27 zeigt einen abschließenden Vergleich zwischen Messung und Simulation für Mitteldruck und Stickoxid anhand einer repräsentativen Versuchsdatenbasis. Es sei noch einmal erwähnt, dass der Modellabstimmungsprozess nach den grundsätzlichen Überlegungen nach Kapitel 6.1 durchgeführt wurde.

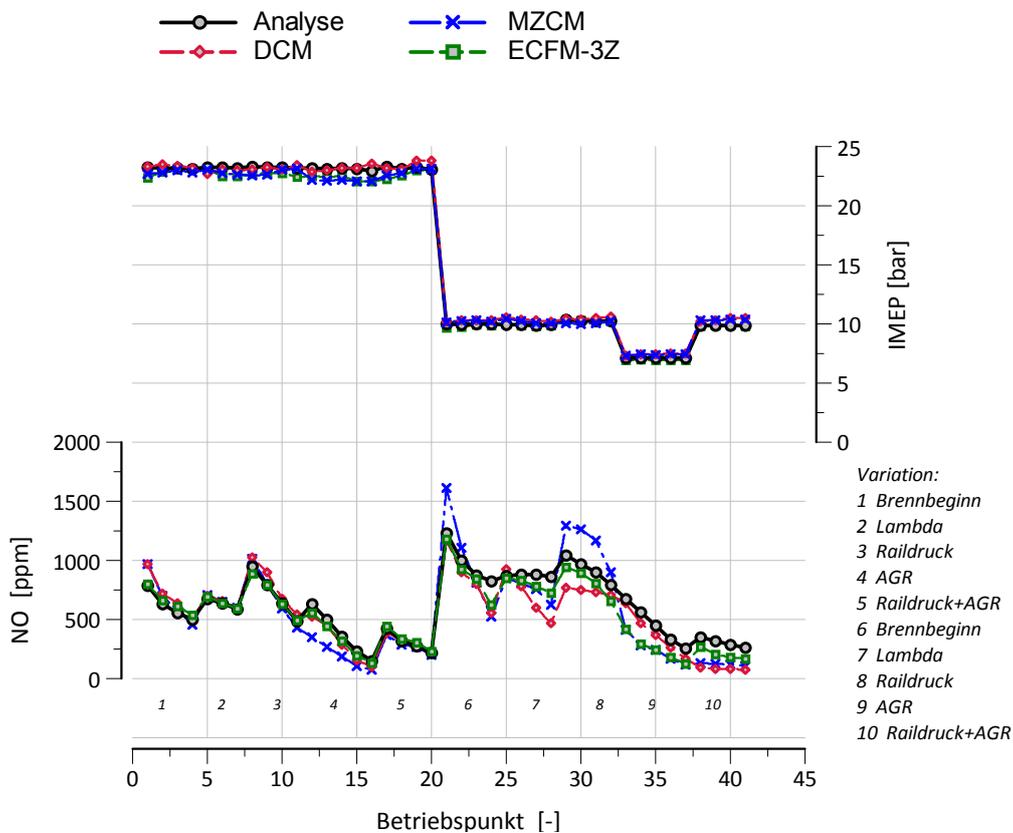


Abbildung 6-27: Vergleich zwischen Messung und Simulation für Mitteldruck und Stickoxid mit konstantem Modellparametern

Es bestätigt sich, dass mit konstantem Modellparametern die Brennrate sowohl mit null- als auch dreidimensionalen Modellen über der Motorlast hervorragend vorausberechnet werden kann. Die resultierenden mittleren Abweichungen für Mitteldruck der Modelle DCM, MZCM und ECFM-3Z entsprechen den Ergebnissen nach Tabelle 6-5 und ergeben einen leichten Vorteil zu Gunsten der 3D-CFD Simulation.

Im unteren Teil von Abbildung 6-27 ist der abschließende Vergleich zwischen Messung und den auf Basis der Brennratenmodelle DCM, MZCM und ECFM-3Z ermittelten Stickoxidkonzentrationen unter Verwendung eines einheitlichen äußeren NO-Kalibrierfaktors zu sehen. Auffallend ist eine schlechtere Übereinstimmung mit der Messung in der Teillast bei Verwendung des MZCM-Modells. Die Modelle DCM und ECFM-3Z zeigen hingegen eine im großen Maße hervorragende Übereinstimmung mit der Messung und bilden die Basis für eine genaue Berechnung von Stickoxid.

Genauigkeitseinbußen in der Berechnung von Stickoxid sind lediglich in der Teillast zu erwarten, da Unterschiede in den Brennraten zwischen Analyse und Simulation vorhanden sind (vgl. Kapitel 6.2). Tabelle 6-6 zeigt die mittlere Abweichung der Datenbasis für Stickoxid und die für die Modelle empfohlenen NO-Kalibrierfaktoren für Voll- und Teillast. Die Bewertung des Lund-Modells wurde in die Tabelle nicht aufgenommen, da Russ durch einen gemeinsamen äußeren Kalibrierfaktor nur unbefriedigend prognostizierbar war.

Variation	NO <sub>x</sub>			Kalibrierfaktor $C_{NO_{out}}$		
	Zeld./DCM	Zeld./MZCM	Zeld./ECFM	DCM	MZCM	ECFM-3Z
Volllast	11,7%	17,9%	6,5%	1,0	1,7	0,8
Teillast	29,5%	34,2%	20,9%	1,0	1,7	0,8
<b>Mittlere Abw.</b>	<b><u>20,6%</u></b>	<b><u>26,1%</u></b>	<b><u>13,7%</u></b>			

Tabelle 6-6: Abschließende Modellbewertung mit konstantem Kalibrierfaktor  $C_{NO_{out}}$

Die Ergebnisse aus Tabelle 6-6 belegen, dass die Vorausberechnung von Stickoxid mit der 3D-CFD Simulation besser gelingt als mit null- oder quasidimensionalen Modellen. Es fällt auf, dass für das nulldimensionale und das reaktionskinetische Modell ein NO-Kalibrierfaktor in der Größenordnung von eins verwendet werden kann. Eine hohe Übereinstimmung mit der Messung ist daher auch mit konstantem äußeren NO-Kalibrierfaktor für null- und dreidimensionale Simulationsmodelle möglich.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der Einsatz des Werkzeugs Simulation eine Voroptimierung von Brennraten und Stickoxid für mittelschnelllaufende Großdieselmotoren ermöglicht. Durch die geringe Anzahl von repräsentativen Messpunkten für den Modellkalibrierungsprozess ist eine effiziente Modellabstimmung mit gleichzeitig hoher Genauigkeit in der Berechnung möglich. Die Situation in der Berechnung von Russ ist auch mit reaktionskinetischen Modellen deutlich weniger befriedigend und bleibt nach wie vor eine Herausforderung.

## 7 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde anhand des Einsatzes von speziellen null- und dreidimensionalen Brennraten- und Emissionsmodellen eine allgemeine Bewertung von Simulationsmodellen für Verbrennung und Schadstoffbildung an Großdieselmotoren durchgeführt. Unterschiedliche AGR-Emissionserfüllungskonzepte wurden mit der 1D-Ladungswechselrechnung bewertet, insbesondere konnten Vorteile für ein diskontinuierliches AGR-System gefunden werden. Mithilfe des diskontinuierlichen Systems gelang es, Vorteile für Verbrauch und AGR-Kühlleistung zu erreichen.

Auf Basis der allgemeinen Vorgehensweise zur Abstimmung der Simulationsmodelle wurde ausführlich auf die Bedeutung der exakten Angabe des Einspritzratenverlaufs hingewiesen. Aufgrund dessen wurden unterschiedliche Methoden zur Bestimmung der Einspritzrate und deren Auswirkungen auf die Simulation von Brennrate und Emissionen mit null- und dreidimensionalen Simulationsmodellen untersucht.

Es stellte sich heraus, dass für eine Vorausrechnung der Verbrennung in der Vollast ein Einspritzratenverlauf nach dem Bernoulli-Prinzip ausreichend genau erscheint, die Verbrennung in der Teillast allerdings nur mit einer zu Grunde gelegten Strahlkrateinspritzrate exakt vorausberechnet werden kann. Eine präzise Prognose für Stickoxid und Russ setzt jedoch eine Einspritzrate nach dem Strahlkraftmessprinzip voraus.

Während für die korrekte Vorhersage der Stickoxid-Emissionen für eine Vielzahl von Parametervariationen ein gut funktionierendes Brennratenmodell ausreichend ist, erfordern Betriebspunkte mit Abgasrückführung und Laständerung eine Weiterentwicklung thermischer Stickoxidmodelle. Folglich wurde auf Basis einer null-dimensionalen Entwicklungsumgebung ein Stickoxidmodell verbessert, um die für Brennverfahrensentwicklung relevanten Entwicklungsparameter besser abzubilden. Das optimierte Modell ermöglichte, Stickoxid anhand einer großen Versuchsdatenbasis und eines breiten Emissionsniveaus wesentlich genauer vorauszuberechnen.

Zur Darstellung der Prognosefähigkeit der einzelnen Simulationsmodelle wurden sowohl für den Vollastfall als auch für Teillast umfangreiche Parametervariationen durchgeführt. Auch wurde die Möglichkeit untersucht, die Verbrennung für einen anderen Motor auf Basis der Modellparameter des mittelschnelllaufenden Großmotors vorauszurechnen. Hierbei stellte sich heraus, dass eine befriedigende Prognose der Verbrennung möglich ist, Genauigkeitsabstriche aber in Kauf zu nehmen sind. Die Ergebnisse der Arbeit belegen, dass eine Vorausrechnung der Verbrennung für eine Vielzahl von Parametervariationen über der Last mit nur einem einzigen Modellparametersatz zielführend war.

Die Bewertung der Versuchsdatenbasis zeigte, dass eine Vorausrechnung von Verbrennung und Stickoxid mit der 3D-CFD Simulation besser gelingt als mit null- oder quasidimensionalen Modellen. Eine Verbesserung von null- und quasidimensionalen Brennratenmodellen hinsichtlich der Wirkung von AGR stellt eine notwendige Entwicklungsmaßnahme dar. Kritisch zu betrachten ist nach wie vor eine detaillierte Prognose von Russ, da in den meisten Fällen nur Tendenzen richtig berechnet werden können. Abschließend ist zu sagen, dass durch die gewonnenen Erkenntnisse ein weiterer Schritt zur Realisierung des virtuellen Motors gelungen ist.

## Literaturverzeichnis

- [1] International Maritime Organization (IMO): MARPOL 73/78 Annex VI, Regulations for the Prevention of Air Pollution from Ships, 1997 (MARPOL Annex VI)
- [2] N. N.: Broschüre Abgasgesetzgebung Diesel- und Gasmotoren, VDMA Motoren und Systeme, Frankfurt am Main, 2011
- [3] Götze, H.J.: Treiber für die Entwicklung von Großdieselmotoren - Internationale Abgasgesetzgebung, 2. Rostocker Großmotorentagung, 2012
- [4] Engelmayer, M.; Wimmer, A.; Pirker, G.; Pemp, B.; Hirschl, G.: Simulation Based Development of Combustion Concepts for Large Diesel Engines, ASME Technical Conference, Morgantown, USA, 2011
- [5] Wimmer et al.: Comparison of the efficiency potential of medium- and high-speed large gas and diesel engines considering future emission limits, MTZ-Fachtagung Heavy Duty-, On- and Off -Highway Engines, Kiel, 2011
- [6] Mohr, H.: Großmotoren und Gasmotoren, Vorlesungsskriptum, Technische Universität Braunschweig, 2005
- [7] Pemp, B.; Hirschl, G.: Konzeptuntersuchung für Großdieselmotoren über 560 kW hinsichtlich zukünftiger Emissionsgesetzgebung, Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik, Bericht Nr. FVT-39/11/PB\_HG/LEC/LDE004-3000, Graz, 2011
- [8] Cartus, T.; Zallinger, M.; Ruhri, F.: Comprehensive Approach for Future TIER 4 Large Diesel Engine Concepts Considering Application Diversity, 21<sup>st</sup> Aachen Colloquium Automobile and Engine Technology, 2012
- [9] Marquardt et. al.: Innermotorische NO<sub>x</sub>-Minderung in mittelschnelllaufenden Großdieselmotoren. MTZ 68, S. 964 – 972, 2007
- [10] Püschel et al.: Abgasrückführung am mittelschnelllaufenden Common-Rail-Schiffsdieselmotor zur Erreichung der IMO Tier III, 13. Tagung der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors, Graz, 2011
- [11] Püschel, M.; Stöber-Schmidt, C.: Mehrfacheinspritzung zur Reduktion der Partikelemissionen an Großmotoren im AGR-Betrieb, 2. Rostocker Großmotorentagung, Rostock, 2012
- [12] Rauter, M.: Potential der Abgasrückführung bei mittelschnelllaufenden Großdieselmotoren, Dissertation, Technische Universität Graz, 2009
- [13] Pemp, B.: Niedrigemissionskonzept für mittelschnelllaufende Lokomotivmotoren ohne Abgasnachbehandlung, Dissertation, Technische Universität Graz, 2012
- [14] Weisser, G.; Wik, C.; Delneri, D.: IMO Tier III – Die Herausforderung für die Großmotorenentwicklung, 13. Tagung der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors, Graz, 2011
- [15] Tinschmann, G.; Holand, P.; Benetschik, H.; Eilts, P.: Potenziale der zweistufigen Aufladung am Großdieselmotor 6L 32/44 CR von MAN, Motortechnische Zeitschrift, MTZ 10, 2008
- [16] Trapp, C.; Klausner, J.; Haidn, M.; Lang, J.: Zweistufige Hochdruck-Turboaufladung für Gasmotoren mit hohem Wirkungsgrad, Aufladetechnische Konferenz, Dresden, 2010

- [17] Herdin, G.: Gasmotoren, Vorlesungsskriptum, Technische Universität Graz, 2003
- [18] Fölzer, K.H.; Ruhri, F.; Engelmayer, M.; Pemp, B.: AGR Konzepte und Aufladestrategien für Tier 4 Großdieselmotoren, 13. Tagung der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors, Graz, 2011
- [19] Wirth, K.: Key technologies for future applications in large engine business, 6<sup>th</sup> MTZ Heavy-Duty, On- and Off-Highway Engines Conference, Kiel, 2011
- [20] Pischinger, R.; Klell, M.; Sams, T.: Thermodynamik der Verbrennungskraftmaschine, 3. Auflage, Springer Verlag, Wien, 2009
- [21] Pirker, G.; Chmela, F.; Wimmer, A.: Automated Parameter Determination for IC Engine Simulation Models, SAE World Congress, Detroit, 2009
- [22] Molinari, B.; Rasser, M.; Tanska, T.: Versuchsplanung für die Entwicklung von Großmotoren, Motortechnische Zeitschrift, MTZ 2, 2005
- [23] Merker, G.; Schwarz, C.; Stiesch, G.; Otto, F.: Verbrennungsmotoren, Simulation der Verbrennung und Aufladung, 3. Auflage, B.G. Teubner Verlag, ISBN 103835100807, 2006
- [24] Patanker, S.: Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Mc Graw-Hill, 1980
- [25] Schutting et al.: Miller- und Atkinson-Zyklus am aufgeladenen Dieselmotor, Motortechnische Zeitschrift, MTZ 06, 2007
- [26] Vibe, I.: Brennverlauf und Kreisprozess von Verbrennungsmotoren, VEB Verlag Technik, Berlin, 1970
- [27] Merker, G.; Hohlbaum, B.; Rauscher, M.: Two-Zone Model for Calculation of Nitrogen-Oxide Formation in Direct-Injection Diesel Engines, SAE International Off-Highway & Powerplant Congress, Milwaukee, USA, 1993
- [28] Heider, G.; Woschni, G.; Zeilinger, K.: Zwei-Zonen Rechenmodell zur Vorausberechnung der NO-Emissionen von direkteinspritzenden Dieselmotoren, 5. Tagung der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors, Heft 67, Graz, 1995
- [29] Chmela, F.; Orthaber, G.; Schuster, W.: Die Vorausberechnung des Brennverlaufs von Dieselmotoren mit direkter Einspritzung auf Basis des Einspritzverlaufs, Motortechnische Zeitschrift, MTZ 59, 1998
- [30] Pötsch, C.; Ofner, H.; Schutting, E.: Assessment of a Multi Zone Combustion Model for Analysis and Prediction of CI Engine Combustion and Emissions, SAE Technical Paper 2011-01-1439, 2011
- [31] Xiaoping, B.; Shu, H.; Dai, Z.; Yin, S.; Duan, C.: A Multi-Zone Model for Prediction of DI Diesel Engine Combustion and Soot Emission, SAE Paper 941900
- [32] Hiroyasu, H.; Kadota, T.; Arai, M.: Development and Use of a Spray Combustion Modeling to Predict Diesel Engine Efficiency and Pollutant Emissions, Part I: Combustion Modeling, Bulletin of the JSME, Vol. 26, No. 214, 1983
- [33] Stiesch, C.: Phänomenologisches Multizonen-Modell der Verbrennung und Schadstoffbildung im Dieselmotor, Dissertation, Universität Hannover, 1999
- [34] Magnussen, B.; Hjertager, B.: On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion, 16<sup>th</sup> Symposium of the Combustion Institute, Pittsburgh, Pennsylvania, 1976

- [35] Röpke, S.: Zu Ursachen der NO-Bildung in einem PKW-DI-Dieselmotor mit Abgasrückführung, Dissertation, Technische Universität Magdeburg, 1996
- [36] Windisch, H.: Thermodynamik – Ein Lehrbuch für Ingenieure, Oldenburg Verlag, 2008
- [37] Schaffer, M.: Einsatz der 3D-CFD Simulation zur Optimierung von Großdieselmotoren, Dissertation, Technische Universität Graz, 2009
- [38] Kyriakides, S.; Dent, J.; Mehta, P.: Phenomenological Diesel Combustion Model Including Smoke and NO Emission, SAE Paper 860330, Detroit, 1986
- [39] Eyzat, P.; Guibet, J.C.: A New Look at Nitrogen Oxides Formation in Internal Combustion, SAE Paper 680124, 1968
- [40] Kožuch, P.: Ein phänomenologisches Modell zur kombinierten Stickoxid- und Rußberechnung bei direkteinspritzenden Dieselmotoren, Dissertation, Universität Stuttgart, 2004
- [41] Hohenberg et al.: Ein halbempirisches Modell zur Berechnung der NOx-Emissionen von Nfz-Dieselmotoren, 8. Tagung der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors, Heft 79, Graz, 2001
- [42] Colin, O.; Benkenida, A.: The 3-Zones Extended Coherent Flame Model (ECFM-3Z) for computing Premixed & Diffusion Combustion; Institut francais du pétrole, Direction Techniques d'applications énergétiques, 2003
- [43] Chmela, F.; Dimitrov, D.; Pirker, G.; Wimmer, A.: Konsistente Methodik zur Vorausberechnung der Verbrennung in Kolbenkraftmaschinen, MTZ 67, 2006
- [44] Ludu, A.; Rauter, M.: EGR - Will it be part of the Large Engine Emission Technology?, 3<sup>rd</sup> Large Engine TechDays, Graz, 2008
- [45] Melchior, J.: Supercharged combustion engine: EP2 129 891 B1; US - 2010\_0095940-A1; PCT/FR 2010 / 000247; US - 2010 - 134 / 259029
- [46] Schutting, E.; Hirschl, G.; Danninger, A.: Diskontinuierliche Ladungswechselsysteme, Motortechnische Zeitschrift, MTZ 03, 2013
- [47] Schutting, E.: Pulse Distributing Manifold, 3. Tagung Motorprozesssimulation und Aufladung, Berlin, 2011
- [48] Takahashi, M.; Tanaka, I.; Ohtsu, M.: Study of Exhaust Gas Separation (EGS) System on 2-stroke Engine, CIMAC Congress, Bergen, 2010
- [49] Pirker, G.; Losonczy, B.; Fimml, W.; Wimmer, A.; Chmela, F.: Predictive Simulation of Combustion and Emission in Large Diesel Engines with Multiple Fuel Injection, CIMAC Paper 235, Bergen, 2010
- [50] Urlaub, A.: Verbrennungsmotoren – Band 1 – Grundlagen, Springer-Verlag, Berlin, ISBN 3-540-18318-3, 1990
- [51] Chmela, F.; Jager, P.; Herzog, P.; Wirbeleit, F.: Emissionsverbesserung an Dieselmotoren mit Direkteinspritzung mittels Einspritzverlaufsformung, Motortechnische Zeitschrift, MTZ 09, 1999
- [52] Moser, F.X.: Dieselmotorentechnik, Vorlesungsskriptum, Technische Universität Wien, 2011

- [53] N.N.: Dieseleinspritztechnik, Robert Bosch GmbH, VDI Verlag, 1993
- [54] Hanjalić, K.; Popovac, M.; Hadžiabdić, M.: A robust near-wall elliptic-relaxation eddy-viscosity turbulence model for CFD, *International Journal of Heat and Fluid Flow* 25 (2004) 1047-1051
- [55] Fimml, W.: Untersuchung der Auswirkung der hydraulischen Eigenschaften von Einspritzdüsen auf die motorische Gemischbildung und Verbrennung, Dissertation, Technische Universität Graz, 2010
- [56] Klell, M.: Höhere Thermodynamik, Vorlesungsskriptum, Technische Universität Graz, 2011
- [57] Desantes, J.M; Payri, R.; Salvador, F.J.; Gimeno, J.: Measurement of Spray Momentum for the Study of Cavitation in Diesel Injection Nozzles, SAE Paper 2003-01-0703, 2003
- [58] Bauer, W.: Empirisches Modell zur Bestimmung des dynamischen Strahlkegelwinkels bei Diesel-Einspritzdüsen, Dissertation, Technische Universität München, 2007
- [59] Eichlseder, H.; Rechberger, E.; Staub, P.: Der Einfluss des Einspritzsystems auf den Verbrennungsablauf bei DI-Dieselmotoren für PKW, 5. Tagung der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors, Heft 67, Graz, 1995
- [60] Frolov et al.: Modelling of Soot Formation in Internal Combustion Engines, Semenov Institut of Chemical Physics, Moskau, Russland
- [61] Schubiger, R.; Boulouchos, K.; Eberle, M.: Rußbildung und Oxidation bei der dieselmotorischen Verbrennung, *Motortechnische Zeitschrift, MTZ* 5, 2002
- [62] Gufler, M.: Entwicklung und messtechnische Verifikation von phänomenologischen Modellen zur Russemissionsberechnung, Dissertation, Technische Universität Graz, 2013
- [63] Wimmer, A.; Engelmayer, M.; Chmela, F.; Pirker, G.; Hirschl, G.: Die Einspritzrate als wesentlicher Faktor zur genauen Simulation von Verbrennung und Schadstoffbildung bei Großdieselmotoren, 2. Rostocker Großmotorentagung, Rostock, 2012
- [64] Tanov, S.: Einspritzratenmessung zur verbesserten Brennratensimulation bei direkteinspritzenden Dieselmotoren, Diplomarbeit, Technische Universität Graz, 2012
- [65] Pattas, K.; Häfner, G.: Stickoxidbildung bei der ottomotorischen Verbrennung, *Motortechnische Zeitschrift, MTZ* 12, 1973
- [66] Miller, R.; Davis, G.; Lavoie, G.; Newman, C.; Gardner, T.: A Super-Extended Zel'dovich Mechanism for NO<sub>x</sub> Modelling and Engine Calibration, SAE Paper 980781, 1998
- [67] Sams, T.: Schadstoffbildung und Emissionsminimierung bei KFZ Teil1&2, Vorlesungsskriptum, Technische Universität Graz, 2010
- [68] Zeldovich, J.: The Oxidation of Nitrogen in Combustion and Explosions, *Acta Physicochimica*, Vol. XXI Nr. 4, Moskau, 1946
- [69] Lavoie et al.: Experimental and Theoretical Study of Nitric Oxide Formation in Internal Combustion Engines; *Combustion Science and Technology*, Vol. 1, 1970

- [70] Heywood, J. B.: Internal Combustion Engine Fundamentals, Mc Graw-Hill, 1988
- [71] Engelmayer, M.: Simulationsmodell für Brennverlauf und NO-Bildung im Dieselmotor mit Direkteinspritzung, Dissertation, Technische Universität Graz, 2001
- [72] De Jaegher, P.: Einfluss der Stoffeigenschaften der Verbrennungsgase auf die Motorprozessrechnung, Habilitation, Technische Universität Graz, 1984
- [73] Meintjes, K.; Morgan, A.P.: Element Variables and the Solution of Complex Chemical Equilibrium Problems, GMR-5827, General Motors Research Laboratories, Michigan, 1987
- [74] Magnussen, B.: Modelling of reaction processes in turbulent flames with special emphasis on soot formation and combustion, General Motors Symposium "Particulate carbon formation during combustion", 1980
- [75] Chmela, F.; Engelmayer, M.; Pirker, G.; Wimmer, A.: Prediction of turbulence controlled combustion in diesel engines, THIESEL Conference on Thermo- and Fluid Dynamic Processes in Diesel Engines, Valencia, 2004
- [76] Pirker, G.: Nulldimensionale Modellierung von Zündverzögerung und Brennratenverlauf bei direkteinspritzenden Dieselmotoren, Dissertation, Technische Universität Graz, 2006
- [77] Pötsch, C.: On 0-dimensional Modeling of Combustion and Pollutant Formation in Diesel Engines, Dissertation, Technische Universität Graz, 2012.
- [78] Varde, K. S.; Popa, D. M.; Varde, L. K.: Spray Angle and Atomization in Diesel Sprays. SAE Technical Paper 841055, Detroit, 1984
- [79] Borman, G. L.; Johnson, J. H.: Unsteady Vaporization Histories and Trajectories of Fuel Drops Injected into Swirling Air. SAE Technical Paper 620271, Detroit, 1962
- [80] Stiesch, G.: Modeling Engine Spray and Combustion Processes. Springer, Berlin, 2003
- [81] Chmela, F.; Pirker, G.; Losonczi, B.; Wimmer, A.; Desantes, J.M.; Garcia-Oliver, J.M.: A New Burn Rate Simulation Model for the Improved Prediction of Multiple Injection Effects on Large Diesel Engines, THIESEL Conference on Thermo- and Fluid Dynamic Processes in Diesel Engines, Valencia, 2010
- [82] Desantes, J.M.; Pastor, J.V.; Garcia-Oliver, J.M.: A 1D model for the description of mixing controlled reacting diesel sprays, Combustion and Flame, 156 234-249, 2009
- [83] Wimmer, A.; Chmela, F.; Engelmayer, M.; Gufler, M.; Hirschl, G.; Pirker, G.: Advances and Challenges in Simulating Combustion and Emission Formation in Large Diesel Engines, 27th CIMAC World Congress on Combustion Engine Technology, Shanghai, 2013
- [84] Wimmer, A.: Analyse und Simulation des Arbeitsprozesses von Verbrennungsmotoren, Habilitation, Technische Universität Graz, 2000
- [85] Hänel, D.: Einführung in die kinetische Theorie der Gase und Lattice-Boltzmann-Methode, Springer Verlag, ISBN: 978-3-540-44247-9, 2004
- [86] Kraßnig, G.: Die Berechnung der Stickoxidbildung im Dieselmotor, Habilitation, Technische Universität Graz, 1976

- [87] Dean, M.; Bozzelli, J.: *Combustion Chemistry of Nitrogen, Gas-Phase Combustion Chemistry*, Springer Verlag New York, ISBN 978-1-4612-7088-1, 2000
- [88] Rajamani et al: *Improvements to Mixture Formation and Combustion on a HD-Diesel Engine by a 3000 bar Injection System*, THIESEL Conference on Thermo- and Fluid Dynamic Processes in Diesel Engines, Valencia, 2012
- [89] Karlson, A.; Magnussen, I.; Balthasar, M.; Mauss, F.: *Simulation of Soot Formation under Diesel Engine Conditions using a detailed Kinetic Soot Model*, SAE International Congress, Paper Nr. 981022, Detroit, USA, 1998
- [90] Liu, A.B. and Reitz, R. D. *Modeling the Effects of Drop Drag and Break-up on Fuel Sprays*, SAE 930072, 1993
- [91] O'Rourke, P.J.; Bracco, F.V.: *Modeling of Drop Interactions in Thick Sprays and a Comparison with Experiments*; IMechE C404/80: pp. 101-116, 1980
- [92] Dukowicz, J.K.: *A Particle-Fluid Numerical Model for Liquid Sprays*, J. Comp. Physics, vol.35, pp. 229-253, 1980
- [93] Naber J.D.;Reitz R.D., "Atomization and Other Breakup Regimes of a Liquid Jet", SAE-Paper 880107: (1988)
- [94] Hirschl, G.: *Weiterführende CFD Simulationen eines Hochleistungsmotorrad-motors mit Benzin-Direkteinspritzung*, Diplomarbeit, Technische Universität Graz, 2008

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1: Aktuelle und zukünftige Stickoxid-Emissionsstandards .....	3 -
Abbildung 1-2: Aktuelle und zukünftige Russ-Emissionsstandards .....	3 -
Abbildung 1-3: Wirkungsgrad- und Leistungsspektrum von Kraftmaschinen [17] .....	4 -
Abbildung 1-4: Marktanteile von Großdieselmotoren [8] .....	5 -
Abbildung 1-5: Betriebspunkte und Applikationen des FM250 Forschungsmotors .....	7 -
Abbildung 2-1: Gegenüberstellung von Einfach- vs. Mehrfacheinspritzung für Notch8- -	10
Abbildung 2-2: Prinzip des Miller-Verfahrens [9] .....	11 -
Abbildung 2-3: Druckverhältnis und Wirkungsgrad für ein- und zweistufige Aufladung eines mittelschnelllaufenden Großdieselmotors .....	12 -
Abbildung 2-4: Funktionseinheiten des SCR-Verfahrens [67] .....	13 -
Abbildung 2-5: Korrelation für Lambda, AGR-Rate, O <sub>2</sub> -Konzentration und NO <sub>x</sub> [67] .-	14 -
Abbildung 2-6: Potentielle AGR-Systemlösungen für mittelschnelllaufende Großmotoren. 15 -	
Abbildung 2-7: Prinzip der diskontinuierlichen Aufteilung des Abgasmassenstroms...-	17 -
Abbildung 2-8: Funktionsweise des diskontinuierlichen AGR-Systems.....-	17 -
Abbildung 2-9: Vollastdruckkurven.....-	18 -
Abbildung 2-10: Verbrauch und Wirkungsgrad von AGR-Konzepten für Vollast.....-	19 -
Abbildung 2-11: Vergleich diskontinuierliches AGR mit konventionellem AGR-Systemen . 19 -	
Abbildung 2-12: Simulation der Dieselverbrennung mit dem MCC-Modell.....-	22 -
Abbildung 2-13: Simulation mit dem Modell von Hiroyasu ohne Re-Entrainment.....-	23 -
Abbildung 2-14: Simulation der Dieselverbrennung mit dem Magnussen-Modell [37]-	24 -
Abbildung 2-15: Berechnung von NO mit und ohne AGR über der Motorlast.....-	25 -
Abbildung 3-1: Beschreibung des Einspritzstrahls über Kegelwinkel und Penetrationslänge .....-	27 -
Abbildung 3-2: Beschreibung des Einspritzstrahls mit dem Multi-Zonen Paket Modell [77] .....-	29 -
Abbildung 3-3: Funktionsweise des ECFM-3Z Modells [42].....-	31 -
Abbildung 3-4: Darstellung der unterschiedlichen Teilprozesse für die Formation und Oxidation von Russ im Lund-Modell .....	37 -
Abbildung 4-1: Einfluss der Turbulenz auf die NO-Berechnung mit/ohne AGR.....-	40 -
Abbildung 4-2: Vergleich der NO-Simulation mit und ohne Stoßfrequenz .....	40 -
Abbildung 4-3: Vergleich der NO-Simulation bei Variation der AGR-Rate über die Last- -	41
Abbildung 4-4: Wirkung der korrigierten Stoßfrequenz auf die NO-Simulation .....	43 -
Abbildung 4-5: Einfluss der Geschwindigkeitskonstante auf die NO-Konzentration....-	44 -
Abbildung 4-6: Brennrate und NO-Bildungsrate in Abhängigkeit vom lokalen Luftverhältnis für Voll- und Teillast .....	45 -
Abbildung 4-7: Einfluss des lokalen Luftverhältnisses im 2-Zonenmodells auf NO.....-	46 -

Abbildung 4-8: Übereinstimmung zwischen NO-Messung und NO-Simulation für unterschiedliche präexponentielle Faktoren und Aktivierungsenergien .....	48 -
Abbildung 4-9 :Vergleich zwischen NO-Messung und NO-Simulation anhand von lastabhängigen Parametervariationen .....	50 -
Abbildung 5-1: Phasen des Verbrennungsablaufs am Dieselmotor .....	51 -
Abbildung 5-2: Einspritzrate eines Großmotors mit Haupt- und Nacheinspritzung ....	52 -
Abbildung 5-3: Durchfluss in Abhängigkeit vom Nadelhub .....	53 -
Abbildung 5-4: Berechnete Einspritzrate aus gemessenen Nadelhubverlauf.....	54 -
Abbildung 5-5: Prinzip der Strahlkraftmesseinrichtung .....	55 -
Abbildung 5-6: Ermittelte Einspritzrate aus der Strahlimpulsmessung .....	56 -
Abbildung 5-7: Einspritzrate aus Stromsignal, Nadelhub und Strahlkraftmessung ....	57 -
Abbildung 5-8: Vergleich von Einspritzrate und Verbrennung für Volllast .....	58 -
Abbildung 5-9: Auswirkungen der Einspritzrate auf IMEP, $Q_B$ und Emissionen bei Volllast	59 -
Abbildung 5-10: Vergleich von Einspritzrate und Verbrennung für Teillast.....	60 -
Abbildung 5-11: Auswirkungen der Einspritzrate auf IMEP, $Q_B$ und Emissionen bei Teillast .....	61 -
Abbildung 5-12: Vergleich der Einspritzraten mit Nacheinspritzung und Brennraten für einen Volllastpunkt mit und ohne AGR .....	62 -
Abbildung 5-13: Einfluss der Einspritzrate auf Wirkungsgrad und Mitteldruck .....	63 -
Abbildung 5-14: Auswirkung der Einspritzrate mit Nacheinspritzung auf NO und Russ-	64 -
Abbildung 5-15: Sensitivität des Spritzbeginns auf die Simulation der Brennrate .....	65 -
Abbildung 5-16: Einfluss des SOI auf Wirkungsgrad, Verbrauch und Emissionen.....	66 -
Abbildung 5-17: Sensitivität des Durchflusses auf die Simulation der Brennrate .....	67 -
Abbildung 5-18: Einfluss des Durchflusses auf Wirkungsgrad, Verbrauch und Emissionen	68 -
Abbildung 5-19: Sensitivität der Öffnungsflanke auf die Simulation der Brennrate ...	69 -
Abbildung 5-20: Auswirkungen der Öffnungsflanke der Einspritzrate auf $NO_x$ und Ruß-	70 -
Abbildung 5-21: Einspritzraten unterschiedlicher Einspritzdüsen für gleiche Kraftstoffmasse und Einspritzdruck.....	70 -
Abbildung 6-1: Vorgehensweise bei der 0D-Modellkalibrierung.....	72 -
Abbildung 6-2: Verwendetes Sektornetz zur Simulation der Einspritzung, Verbrennung und Schadstoffbildung .....	73 -
Abbildung 6-3: Vorgehensweise bei der 3D-CFD Modellkalibrierung .....	74 -
Abbildung 6-4: Brennratensimulation für die Variation von Last und Drehzahl .....	76 -
Abbildung 6-5: Darstellung von berechneter und gemessener Stickoxid- und Russkonzentration in Abhängigkeit von Last und Drehzahl .....	77 -
Abbildung 6-6: Variation der AGR-Rate mit hohem Drall für Volllast.....	78 -
Abbildung 6-7: Vergleich von berechneter und gemessener Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation der AGR-Rate für Volllast .....	79 -
Abbildung 6-8: Variation der AGR-Rate mit hohem Drall für Teillast .....	80 -
Abbildung 6-9: Vergleich von berechneter und gemessener Stickoxid- und	

Russkonzentration bei Variation der AGR-Rate für Teillast.....	- 81 -
Abbildung 6-10: Variation des Einspritzdrucks für Volllast .....	- 82 -
Abbildung 6-11: Vergleich von berechneter und gemessener Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Einspritzdrucks für Volllast.....	- 83 -
Abbildung 6-12: Variation des Einspritzdrucks für Teillast.....	- 84 -
Abbildung 6-13: Stickoxid und Russ bei Variation des Einspritzdrucks in der Teillast.-	- 85 -
Abbildung 6-14: Variation des Ladedrucks für die Volllast.....	- 86 -
Abbildung 6-15: Ergebnisse für Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Ladedrucks in der Volllast .....	- 87 -
Abbildung 6-16: Variation des Ladedrucks in der Teillast.....	- 88 -
Abbildung 6-17: Ergebnisse für Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Ladedrucks in der Teillast .....	- 89 -
Abbildung 6-18: Variation des Brennbeginns für die Volllast .....	- 90 -
Abbildung 6-19: Ergebnisse für Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Brennbeginns in der Volllast .....	- 91 -
Abbildung 6-20: Variation des Brennbeginns in der Teillast.....	- 92 -
Abbildung 6-21: Ergebnisse für Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Brennbeginns in der Teillast .....	- 93 -
Abbildung 6-22: Variation Einspritzdruck mit konstanter AGR-Rate, Volllast .....	- 94 -
Abbildung 6-23: Ergebnisse für Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Einspritzdrucks mit konstanter AGR-Rate, Volllast .....	- 95 -
Abbildung 6-24: Variation Einspritzdruck mit konstanter AGR-Rate, Teillast .....	- 96 -
Abbildung 6-25: Ergebnisse für Stickoxid- und Russkonzentration bei Variation des Einspritzdrucks mit konstanter AGR-Rate, Teillast.....	- 97 -
Abbildung 6-26: Vergleich der Brennraten des Schnellläufers für Voll- und Teillast...-	- 98 -
Abbildung 6-27: Vergleich zwischen Messung und Simulation für Mitteldruck und Stickoxid mit konstantem Modellparametern.....	- 101 -

## Tabellenverzeichnis

Tabelle 1-1: Gliederung von Großmotoren nach [6].....	- 4 -
Tabelle 1-2: Technische Daten des FM250 Einzylinder-Forschungsmotors .....	- 6 -
Tabelle 4-1: Geschwindigkeitskonstanten für die erste Hinreaktion nach [23].....	- 44 -
Tabelle 4-2: Vergleich unterschiedlicher präexponentieller Faktoren und Aktivierungsenergien zur Berechnung von Stickoxid.....	- 49 -
Tabelle 5-1: Bewertung von Methoden zur Bestimmung der Einspritzrate .....	- 71 -
Tabelle 6-1: Vergleich für Spraykegel und Wandinteraktion aus optischer Untersuchung und 3D-CFD Simulation .....	- 74 -
Tabelle 6-2: Kenndaten des untersuchten Motors.....	- 97 -
Tabelle 6-3: Bewertung von Simulationsmodellen für die Volllast.....	- 99 -
Tabelle 6-4: Bewertung von Simulationsmodellen für die Teillast.....	- 100 -
Tabelle 6-5: Mittlere Abweichung der gesamten Datenbasis.....	- 100 -
Tabelle 6-6: Abschließende Modellbewertung mit konstantem Kalibrierfaktor $C_{NO_{out}}$	- 102 -