



## **Masterarbeit**

# **Simulatorische Untersuchung von Hardwarekonfigurationen eines Diesel-PKW- Abgasstrangs**

**Hannes Wancura, BSc**

eingereicht am

*Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik  
Technische Universität Graz*

*Vorstand: Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Helmut Eichlseder*

Betreuer:

*Dipl.-Ing. Dr. techn. Eberhard Schutting, TU Graz*

Externe Betreuer:

*Dipl.-Ing. Dr. techn. Ingo Kristian Allmer, AVL List GmbH  
Dipl.-Ing. Dr. techn. Albert Beichtbuchner, AVL List GmbH*

Graz, August 2012

## **Vorwort**

Diese Masterarbeit ist im Zuge meiner Tätigkeit als Diplomand im Unternehmen AVL List GmbH entstanden. Das Thema „*Simulatorische Untersuchung von Hardwarekonfigurationen eines Diesel-PKW-Abgasstrangs*“ wurde mir infolge meiner damaligen Tätigkeit in der AVL angeboten, welches ich aufgrund des Inhaltes gerne angenommen habe. Nachdem dieses Thema am Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik von Univ.-Prof. DI. Dr. techn. Helmut Eichlseder angenommen und die Betreuung von Herrn Dr. Eberhard Schutting zugesagt wurde, konnte ich mit der eigentlichen Arbeit beginnen. Es wurde von mir erstmals eine derartige modellunterstützte Konzeptuntersuchung für eine Diesel-PKW-Anwendung in diesem Umfang durchgeführt.

Bei meinem Betreuer Herrn Dr. Eberhard Schutting möchte ich mich gerne für die Unterstützung der organisatorischen Einzelheiten und geleisteten Hilfestellung bei der Durchführung der Arbeit bedanken.

Von seitens der AVL möchte ich mich gerne bei meinen beiden Betreuern Herrn Dr. Ingo Allmer, Herrn Dr. Albert Beichtbuchner und den übrigen Mitarbeitern der Abteilung DEA für die Unterstützung und Hilfsbereitschaft bedanken.

## Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen/Hilfsmittel nicht benutzt, und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Graz, am .....

.....

(Unterschrift)

Statutory declaration

I declare that I have authored this thesis independently, that I have not used other than the declared sources/resources, and that I have explicitly marked all material which has been quoted either literally or by content from the used sources.

.....

(date)

.....

(signature)

## Zusammenfassung

Der Inhalt dieser Arbeit befasst sich mit der Parametrierung von Nachbehandlungsmodellen (1-D) und mit der modellunterstützten Konzeptuntersuchung von drei unterschiedlichen Systemen. Das Ziel hierbei ist, mit einer bestehenden Abgasnachbehandlungskonfiguration das Potential hinsichtlich niedrigster Emissionen ausnutzen zu können. Als Simulationswerkzeug wurden unterschiedliche MATLAB-Simulink-Modelle eingesetzt, darunter wurde auch ein MoBEO-Modell des verwendeten Verbrennungsmotors, welches neben physikalischen auch empirische Ansätze beinhaltet, die das Motorverhalten abbilden.

Vorerst wurden die Abgasnachbehandlungsmodelle auf Basis vorhandener Messungen parametriert, welche am Motorenprüfstand der TU Graz durchgeführt wurden. Im Zuge der Modellparametrierung konnten Schwachstellen aufgezeigt werden, z.B. fehlende Reaktionen, numerische Instabilität, fehlende Transportlimitierung und fehlende Messungen für die Reaktionsabstimmung. Nachdem in der Arbeit die unterschiedlichen Simulationsmodelle nur angewandt wurden, mussten einige AVL-Mitarbeiter auftretende Änderungen in der Modellierung und Parametrierung der Modelle durchführen. Neben dem gesetzten Zeitlimit für die Modellabstimmung waren diese Rahmenbedingungen ausschlaggebend für die erreichbare Modellqualität. Für ECAT, DOC, cDPF und SCR konnten unter diesen Bedingungen akzeptable Ergebnisse erzielt werden. Das sDPF-Modell konnte den Ansprüchen der Arbeit nicht genügen und wurde gegen ein Ersatzsystem bestehend aus SCR und DPF ausgetauscht.

Anschließend an der Parametrierung wurden unter Verwendung der Simulationsmodelle drei Abgasnachbehandlungskonzepte untersucht und optimiert. Für diesen Abschnitt wurde ein MoBEO-Modell des VOLVO-I5D Motors eingesetzt und damit unterschiedliche Betriebsstrategien gerechnet. Unter Verwendung dieser Ergebnisse wurden die Inputdaten für die nachfolgende Offline-Simulation des EAS-Konzepts erstellt. Diese Vorgehensweise war notwendig, da während der Simulation des Gesamtsystems numerische Instabilitäten auftraten und dies zu gravierenden Fehlern führte. In Abhängigkeit der gewählten Konzepte wurden verschiedene Optimierungen durchgeführt, die neben Hardware auch die eingesetzte Betriebsstrategie umfasst. Aus den Ergebnissen dieser Optimierungen wird klar, dass in Abhängigkeit des eingesetzten Systemaufbaus die Anforderungen an das Erreichen bestimmter Emissionsgrenzwerte, wie ULEV50 oder SULEV, unterschiedlich sind. Damit wird gezeigt, dass die Notwendigkeit besteht den Motor und die Abgasnachbehandlung als ein Gesamtsystem zu sehen. Abschließend wurden die Konzepte kurz zusammengefasst und bewertet.

Wichtig für zukünftige Emissionsgesetzgebungen ist ein passendes Gesamtsystem (Motor und Abgasnachbehandlung) zu finden, dabei muss die Betriebsstrategie des Motors auf die Anforderungen des EAS abgestimmt werden, diese Vorgehensweise wurde generell für die unterschiedlichen Konzepte durchgeführt. Durch den Einsatz der numerischen Simulationsmodelle kann verhältnismäßig einfach und schnell eine Systemoptimierung durchgeführt werden, die auf einem Motorprüfstand mit einem hohen zeitlichen und finanziellen Aufwand verbunden wäre. Aufgrund dessen bietet die in der Arbeit gezeigte Vorgehensweise der modellunterstützten Konzeptuntersuchung ein großes Potential für das Thema „niedrigster Emissionen-SULEV“.



## Abstract

This work deals with the parameterization of 1 dimensional exhaust aftertreatment models and with the model based concept studies of three different systems. Herewith the aim is able to use the available potential concerning to lowest emissions with an existing exhaust aftertreatment configuration. With it the benefit of a model based application is shown within the area of exhaust aftertreatment. As simulation tools different MATLAB-Simulink-models were used. For the combustion engine a MoBEO-model was used, which contains physical and empiric numerical algorithm to reproduce the engine behavior.

For the time being the simulation models were parameterized on the basis of available measurements, which were made on the engine test bed at the TU Graz. In the course of the model parameterization weak spots could be indicated, like missing reactions, numerical instability, missing transport limitation and missing measurements. Necessary changes were carried out by AVL employees during the investigation. Beside the composed time limit for the model calibration the basic conditions were decisively for the reachable model quality. For ECAT, DOC, cDPF and SCR acceptable results were achieved. The sDPF model was not able to meet the claims of the work and was exchanged by a spare system composed of SCR and DPF.

Afterwards to the parameterization the simulation models were reviewed and optimized in three different exhaust aftertreatment concepts. For this segment a MoBEO model of the engine VOLVO-I5D was used to simulate different control strategies. Using these results the input data were generated for the following off-line simulation of the EAS. This procedure was necessary, because during the simulation of the overall system numerical instabilities appeared and serious mistakes were due to this. In dependence of the selected concept different optimizations were made, which includes beside hardware also the used operation strategy. From the results of this optimization was apparent, that as a function of the used system construction the requirements for the achievement of certain emission standards, like ULEV50 or SULEV, are different. It falls into place that it is necessary to look at the engine and the exhaust aftertreatment as an overall system. Finally the concepts were summarized and evaluated.

Importantly for future emission legislations is to find a suitable overall system (engine and exhaust gas aftercare). The operation strategy of the engine and the requirements of the exhaust aftertreatment have to be calibrated together, this approach was made in general for these different concepts. Through the use of numerical simulation models it is proportionally easy and fast to make a system optimization. Compare to an optimization which would be done on an engine test this will require much less time and financial effort. Therefore the approach shown in this work of the model based concept study offers a bit potential for the subject „of the lowest issues-SULEV“.

# Inhaltsverzeichnis

<b>Vorwort</b> .....	<b>I</b>
<b>Eidesstattliche Erklärung</b> .....	<b>II</b>
<b>Zusammenfassung</b> .....	<b>III</b>
<b>Abstract</b> .....	<b>IV</b>
<b>Abkürzungen, Formelzeichen und Indizes</b> .....	<b>VII</b>
<b>1 Einleitung</b> .....	<b>- 1 -</b>
1.1 Gesamtsystem Motor und Abgasnachbehandlung.....	- 1 -
1.2 Inhalt der Arbeit.....	- 1 -
<b>2 Grundlagen</b> .....	<b>- 3 -</b>
2.1 Verbrennung in Kolbenmaschinen .....	- 3 -
2.1.1 Verbrennung in einer Verbrennungskraftmaschine, charakteristische Merkmale .....	- 3 -
2.1.2 Schadstoffbildung in Verbrennungskraftmaschinen .....	- 3 -
2.1.3 Zusammensetzung des Rohabgases.....	- 4 -
2.1.4 Gesetzliche Limitierungen der Schadstoffemissionen .....	- 9 -
2.2 Abgasnachbehandlung.....	- 10 -
2.2.1 Katalytische Reaktion.....	- 10 -
2.2.2 Abgasnachbehandlungssysteme .....	- 12 -
2.2.3 Drei-Wege-Katalysator .....	- 15 -
2.2.4 DOC–Diesel Oxidationskatalysator .....	- 17 -
2.2.5 Diesel-Partikelfilter .....	- 19 -
2.2.6 SCR-Katalysator.....	- 20 -
2.2.7 NO <sub>x</sub> -Speicherkatalysator.....	- 22 -
2.3 Kinetik .....	- 22 -
2.3.1 Entropie, freie Enthalpie, freie Energie, Affinität und chemisches Gleichgewicht.....	- 23 -
2.3.1.1 Chemisches Gleichgewicht.....	- 24 -
2.3.2 Reaktionskinetik.....	- 24 -
2.3.2.1 Reaktionsgeschwindigkeit .....	- 25 -
2.3.2.2 Gleichgewichtsreaktion .....	- 25 -
2.3.2.3 Elementarreaktionen .....	- 26 -
2.3.2.4 Temperaturabhängigkeit des Geschwindigkeitskoeffizienten .....	- 27 -
<b>3 Prüfstandsaufbau</b> .....	<b>- 28 -</b>
3.1 Motor .....	- 28 -
3.2 Abgasnachbehandlungskomponenten.....	- 29 -
3.3 Messtechnik.....	- 31 -
<b>4 Parametrierung der Einzelkomponenten</b> .....	<b>- 32 -</b>
4.1 Vorgehensweise.....	- 32 -
4.2 DOC-Parametrierung .....	- 33 -
4.2.1 Durchsicht und Plausibilisieren der Messdaten.....	- 34 -
4.2.2 Erstellung der Inputdaten für die Parametrierung .....	- 36 -
4.2.3 Geometrie- und Materialparameter .....	- 36 -
4.2.4 Bestimmung der Kinetik-Parameter.....	- 37 -
4.2.5 Verifizierung Messung/Rechnung.....	- 43 -

4.3	ECAT-Parametrierung.....	- 47 -
4.4	cDPF-Parametrierung .....	- 50 -
4.5	SCR-Parametrierung.....	- 54 -
4.6	sDPF-Parametrierung .....	- 57 -
4.7	Zusammenfassung Parametrierung der Einzelkomponenten.....	- 59 -
<b>5</b>	<b>EAS-Konzepte (Emission After Treatment System) .....</b>	<b>- 60 -</b>
5.1	Vorgehensweise für Konzeptuntersuchung .....	- 61 -
5.2	Abgasnachbehandlungssystem1 .....	- 65 -
5.2.1	System1, Ausgangsbasis mit 4“DOC .....	- 66 -
5.2.2	System1, 6“DOC .....	- 71 -
5.2.3	System1, 6“DOC und 50% höhere Kinetik-Parameter .....	- 73 -
5.2.4	Sensibilitätsstudie (Gestaltung EAS, DPF und SCR).....	- 76 -
5.2.4.1	Gestaltung EAS.....	- 76 -
5.2.4.2	DPF und SCR.....	- 77 -
5.2.5	Zusammenfassung System1 .....	- 78 -
5.3	Abgasnachbehandlungssystem2 .....	- 80 -
5.3.1	System2, Ausgangsbasis 4“DOC .....	- 81 -
5.3.2	System2, 6“DOC und mit 50% höhere Kinetik-Parameter .....	- 85 -
5.3.3	Anpassung der RHU-Funktion an System2 .....	- 88 -
5.3.4	Zusammenfassung System2 .....	- 93 -
5.4	Abgasnachbehandlungssystem3 .....	- 94 -
5.4.1	Hardwarevariation, PTDOC-Volumen.....	- 95 -
5.4.2	System3, Ausgangsbasis 6“DOC und mit 50% höhere Kinetik-Parameter .....	- 97 -
5.4.3	Anpassung der RHU-Funktion an System3 .....	- 100 -
5.4.4	Zusammenfassung System3 .....	- 104 -
5.5	Schlussfolgerung .....	- 105 -
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick.....</b>	<b>- 107 -</b>
6.1	Zusammenfassung .....	- 107 -
6.2	Ausblick.....	- 108 -
	<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>- 109 -</b>
	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>- 112 -</b>
	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>- 113 -</b>
	<b>Anhang.....</b>	<b>- 115 -</b>
a.	Eingesetzte Testzyklen in EU, USA und Japan.....	- 115 -
b.	Charakterisierungsmessungen SCR und sDPF .....	- 116 -
c.	Validierung Abgasnachbehandlungssystem1 .....	- 117 -
d.	Zyklusergebnisse Abgasnachbehandlungssystem1 .....	- 122 -
e.	Zyklusergebnisse Abgasnachbehandlungssystem2 .....	- 123 -

## Abkürzungen, Formelzeichen und Indizes

### Abkürzungen und Formelzeichen

$A, A' * T^b$	präexponentiellen Faktor [ $mol^{-n+1} cm^{3*(n-1)} s^{-1}$ ]
$A^o$	Affinität [J/mol]
AGR	Abgasrückführung
$BaCO_3$	Bariumcarbonat [ppm]
$c_j, [A]$	Konzentration der Spezies j/P [mol/m <sup>3</sup> ]
$c_{mvi}^o$	molare spezifische Wärmekapazität $v$ =konst. [J/molK]
$c_{mpi}^o$	molare spezifische Wärmekapazität $p$ =konst. [J/molK]
$c_p$	spezifische Wärmekapazität $p$ =konst. [J/kgK], Ruß [ppm]
CEB	Abgasmessgerät (Combustion Emission Bench)
cDPF	katalytisch beschichteter Diesel-Partikelfilter
CFD	Computational-Fluid-Dynamics
$CH_4$	Methan [ppm]
$CO$	Kohlenmonoxid [ppm]
$COHb$	Kohlenmonoxid Hämoglobin [ppm]
$CO_2$	Kohlendioxid [ppm]
CRT	Continuous-Regenerating-Trap
DOC	Diesel-Oxidationskatalysator
DPF	Diesel-Partikelfilter
<i>DWN</i>	downstream, stromabwärts
$\Delta_R H_m^o$	molare Standartreaktionsenthalpie [J/mol]
$\Delta_R S_m^o$	molare Standartreaktionsentropie [J/molK]
$\Delta_R G_m^o$	molare Standartreaktionsentropie [J/mol]
$\Delta_R F_m^o$	molare freie Standartreaktionsenergie [J/mol]
$E'_a$	Aktivierungsenergie [J/mol]
EAS	Exhaust-Aftertreatment-Systems
ECAT	elektrisch beheizter Katalysator
EGR	Emission-Gas-Recirculation
EO	Engine-Out
EOM	Engine-Operation-Mode
$F$	freie Energie [J]
FTIR	Fourier-Transform-Infrarot-Spektrometer
$G$	freie Enthalpie [J]
$H$	Enthalpie [J]
$HC$	Kohlenwasserstoffe, C1 basierend [ppm]
IPCC	Intergovernmental Panle on Climate Change

$K$	Gleichgewichtskonstant [-]
$K_c$	Gleichgewichtskonstante, gerechnet mit Konzentrationen [-]
$K_p$	Gleichgewichtskonstante, gerechnet mit Partialdrücken [-]
$k$	Geschwindigkeitskonstante [ $mol^{-n+1} cm^{3*(n-1)} s^{-1}$ ]
$k^{(f)}$	Geschwindigkeitskonstante der Hinreaktion [ $mol^{-n+1} cm^{3*(n-1)} s^{-1}$ ]
$k^{(r)}$	Geschwindigkeitskonstante der Rückreaktion [ $mol^{-n+1} cm^{3*(n-1)} s^{-1}$ ]
LNT	NOx Speicherkatalysator (Lean NOx Trap)
$L_{st}$	stöchiometrischer Luftbedarf [kmolLuft/kmolKraftstoff]
$m_i$	Masse i [kg]
$m_L$	tatsächliche Luftmasse [kg]
$m_{Lst}$	stöchiometrische Luftmasse [kg]
$m_{f_{EGR}}$	EGR-Massenstrom [kg/s]
$m_{f_{EM}}$	Abgasmassenstrom mit EGR [kg/s]
$m_{f_{EXH}}$	Abgasmassenstrom ohne EGR [kg/s]
$m_{f_{fuel}}$	Kraftstoffmassenstrom in [kg/s]
$mi$	Meile
$mpg(US)$	Miles per Gallon, nach US Gallone
$n$	Laufvariable [-]; Reaktionsordnung [-]
$n_i$	Molzahl der Komponente i [mol]
$NH_3$	Ammoniak [ppm]
$NMHC$	Non Methan HC, ( $HC-CH_4$ )/3 C3 basierend [ppm]
$NO$	Stickstoffdioxid [ppm]
$NO_2$	Stickstoffdioxid [ppm]
$N_2O$	Diestickstoffoxid, Lachgas [ppm]
$NO_x$	Stickoxide [ppm]
$O_2$	Sauerstoff [ppm]
$O_{2st}$	stöchiometrische Sauerstoffbedarf [kmol $O_2$ /kmolKraftstoff]
$p$	Druck [Pa] [bar]
PAH	polyzyklische Aromaten
PM-Kat	Particulate-Matter-Katalysator
PTDOC	Pre Turbine DOC, DOC vor Turbine
$R$	spezifische Gaskonstante [J/kgK]
$R_m$	allgemeine (molare) Gaskonstante [J/molK] $R_m = 8.314$
RHU	Rapid-Heat-Up
$\dot{r}$	Reaktionsgeschwindigkeit [kmol/m <sup>3</sup> s]
$S$	Entropie [J/K]
SULEV	Super Ultra Low Emission Vehicle

sDPF	selektiv katalytisch beschichteter Diesel-Partikelfilter
SCR	Selektive katalytische Reduktion (Selective-Catalytic-Reduction)
SOF	Soluble-Organic-Fraction
$t$	Zeit [s]
$T$	Temperatur [°C]
$t_0$	Zeit zum Zeitpunkt 0[s]
TCI	Aufgeladen und Ladeluftgekühlt (Turbo-Charged-Intercooled)
TP	Tail-pipe
$U$	innere Energie [J]
ULEV	Ultra Low Emission Vehicle
$US$	upstream, stromaufwärts
$v$	spezifisches Volumen [m <sup>3</sup> /kg]
$V$	Volumen [m <sup>3</sup> ] [l]
$V_2O_5$	Vanadium Pentoxide
$\alpha$	Verhältnis Harnstoff- zu NO <sub>x</sub> -Mengenstrom [molNH <sub>3</sub> /molNO <sub>x</sub> ]
$\lambda$	Wärmeleitfähigkeit [W/mK]; Luftverhältnis [–]
$\mu_i$	chemisches Potential [J/mol] [Gibbs]
$v_i$	Molanteil der Komponente i [–]
$\rho$	Dichte [kg/m <sup>3</sup> ]

### Indizes und Operatoren

$d$	vollständiges Differential
$\partial$	partiell Differential
$\Pi$	Produkt
$\Sigma$	Summe
$\Delta$	Differenz zweier Größen; Laplace-Operator
$^0$	bezogen auf Standardbedingungen
$m$	molare Größen
$i$	Komponente bezogen
"	Zoll

# 1 Einleitung

In den 60er Jahren wurden erstmals von der kalifornischen Regierung Abgasgrenzwerte für den Straßenverkehr verabschiedet, da die klimatische Situation im Westen der USA die Smogbildung verstärkte. Ausgehend von der amerikanischen Abgasgesetzgebung wurden in den anderen Industrieländern eigene Gesetzgebungen für den Straßenverkehr eingeführt. Heute gelten die europäischen und amerikanischen Abgasnormen als die beiden wichtigsten Limitierungen und sind damit richtungsweisend. Die unterschiedlichen Abgasgesetzgebungen limitieren die von den Fahrzeugen emittierten Schadstoffe (wie Kohlenmonoxid  $CO$ , unverbrannte Kohlenwasserstoffe  $HC$ , Stickoxide  $NO_x$  und Partikel (PM und PN)), die gesundheitsschädlichen Einfluss auf den Menschen haben. Eine effektive Reduzierung dieser Schadstoffe wurde mit Hilfe der Katalysatortechnik ermöglicht, die erstmals in den 70er Jahren eingesetzt wurde und bis heute ausschlaggebend für die erreichbaren Emissionsgrenzwerte ist.

## 1.1 Gesamtsystem Motor und Abgasnachbehandlung

Die Entwicklung der Katalysatoren begann im Jahr 1976 ausgehend vom Drei-Wege-Katalysator, erstmals wurde serienmäßig ein Katalysator im Volkswagen Golf1 für den US-Amerikanischen Markt verbaut. Sowohl für heutige als auch für zukünftige Emissionsgesetzgebungen ist die Abgasnachbehandlung ausschlaggebend um die geforderten Grenzwerte erreicht zu können, aufgrund dessen ist eine genaue Untersuchung der Abgaskatalysatoren erforderlich. Außerdem müssen die Verbrennung und die damit verbundenen Rohemissionen auf die Anforderungen der Abgasnachbehandlung abgestimmt werden. Eine experimentelle Untersuchung und Optimierung bestimmter Komponenten und Betriebsstrategien ist mit hohem zeitlichem und finanziellem Aufwand verbunden. Eine gute Alternative dazu bietet die numerische Simulation, die im letzten Jahrzehnt stark an Bedeutung gewonnen hat, aufgrund der stetig ansteigenden Rechenleistungen [16]. Die Zielsetzung besteht darin, dass verschiedene echtzeitfähige Simulationswerkzeuge für die Entwicklung zur Verfügung stehen.

## 1.2 Inhalt der Arbeit

In dieser Arbeit werden unterschiedliche MATLAB-Simulink-Modelle eingesetzt. Die Abgasnachbehandlungsmodelle wurden laut AVL auf Basis der BOOST-Modelle erstellt [1], wohingegen für das verwendete Zylindermodell (MoBEO) bis dato noch kein Nachschlagewert vorhanden ist. Diese MoBEO-Modelle bestehen aus physikalischen und empirischen Ansätzen, damit wird das Motorverhalten im Vergleich zu aufwändigen CFD Modellen in einer einfachen Weise abgebildet. Nachdem die vorhandenen Simulationsmodelle der Katalysatoren und Filter parametrisiert wurden, konnte durch Einsatz dieser Modelle eine EAS-Konzeptuntersuchung durchgeführt werden. Hiermit soll gezeigt werden, welche Möglichkeiten heutzutage durch den Einsatz numerischer Modelle bestehen. Zusätzlich werden die Schwierigkeiten und die offenen Punkte in der Modellentwicklung aufgezeigt.

In **Kapitel 2** werden die notwendigen Grundlagen für den Inhalt und Hintergründe dieser Arbeit vermittelt. Es wird generell die Verbrennung in einer Kolbenmaschine und die damit verbundenen Emissionsbildung erläutert. Zudem sind die unterschiedlichen Schadstoffe erklärt und die limitierenden Emissionsgesetzgebungen angeführt. Außerdem wird auf die Abgasnachbehandlungssysteme eingegangen und der prinzipielle Aufbau sowie Wirkungsweise beschrieben. Abschließend zu diesem

Kapitel wird die Reaktionskinetik behandelt, darin werden grundlegende Größen und Mechanismen beschrieben.

Das **Kapitel 3** gibt einen kurzen Überblick über den Prüfstands Aufbau, den Versuchsträger, die eingesetzten Abgasnachbehandlungskomponenten und die verwendete Emissionsmesstechnik.

Die Parametrierung der unterschiedlichen Abgaskatalysatoren und –filter wird in **Kapitel 4** gezeigt. Dabei wird die Vorgehensweise bei der DOC-Modellabstimmung in detaillierter Form angeführt und anschließend eine Validierung des Modells durchgeführt. Für die übrigen Simulationsmodelle wird ausschließlich eine kurze Zusammenfassung gezeigt, da bei der Parametrierung eine ähnliche Vorgehensweise wie für den DOC eingesetzt wurde.

**Kapitel 5** umfasst die Konzeptuntersuchung der unterschiedlichen Systemvarianten. Dazu wird jedes System untersucht und entsprechende Optimierungen durchgeführt. Das Ziel dabei ist mit den bestehenden Abgasnachbehandlungskomponenten niedrigste Emissionswerte (ULEV50 und SULEV) zu erreichen. Zum Schluss werden die untersuchten Systeme kurz zusammengefasst und eine Systemcharakterisierung angegeben.

Im letzten **Kapitel 6** ist eine kurze Zusammenfassung und ein genereller Ausblick für den Einsatz von Simulationsmodellen in Konzeptuntersuchungen angegeben.

Zusätzlich sind im **Anhang** nützliche Informationen für den Inhalt der Arbeit angeführt.



## 2 Grundlagen

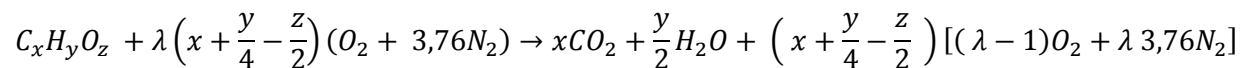
In Kapitel Grundlagen sollen die notwendigen Hintergründe und das Grundwissen für die Abgasnachbehandlung in PKW-Anwendungen vermittelt werden. Der Inhalt befasst sich mit der Entstehung der Emissionen, den gesetzlichen Rahmenbedingungen, den Möglichkeiten der Schadstoffreduzierung und mit kinetischen Grundlagen. Basierend auf dem Thema der Arbeit wird bevorzugt auf die Problematik der Diesel-PKW-Anwendungen eingegangen.

### 2.1 Verbrennung in Kolbenmaschinen

An die Verbrennung in einer Kolbenmaschine sind sehr hohe Anforderungen gestellt, denn der Verbrennungsprozess ist örtlich und zeitlich durch die Brennraumgeometrie begrenzt. Für einen direkt-einspritzenden Dieselmotor sind die Einleitung und der Ablauf der Verbrennung von vielen Faktoren abhängig, welche maßgeblich die Schadstoffbildung beeinflussen.

#### 2.1.1 Verbrennung in einer Verbrennungskraftmaschine, charakteristische Merkmale

Die Bruttoreaktion beschreibt die vollständige Umsetzung der Edukte ohne Berücksichtigung der Dissoziation. Aus dieser Reaktion kann die Zusammensetzung der Produkte einfach errechnet werden. Hier dargestellt ist die Bruttoreaktionsgleichung für die Verbrennung von Kraftstoff ( $C_xH_yO_z$ ) mit Luft ( $O_2 + N_2$ ) [12]:



Mit Lambda  $\lambda$  bezeichnet man die Luftzahl bzw. das Luftverhältnis. Definiert ist Lambda aus dem Verhältnis der tatsächlichen zur stöchiometrischen Luftmasse:

$$\lambda = \frac{m_L}{m_{L_{st}}} = \frac{L}{L_{st}}$$

$\lambda = 1$  bedeutet, dass die Verbrennung unter stöchiometrischen Bedingungen,

$\lambda < 1$  bedeutet, dass die Verbrennung mit Luftmangel (Fettverbrennung),

$\lambda > 1$  bedeutet, dass die Verbrennung mit Luftüberschuss (Magerverbrennung) abläuft.

Mit  $\lambda = 1$  kann der stöchiometrische Sauerstoffbedarf  $O_{2st}$  ermittelt werden:

$$O_{2st} = \left( x + \frac{y}{4} - \frac{z}{2} \right) \frac{[kmol O_2]}{[kmol Kraftstoff]}$$

Die volumetrische Zusammensetzung der Frischluft kann vereinfacht aus Stickstoff (79% =  $N_2$ ) und Sauerstoff (21% =  $O_2$ ) angenommen werden. Daraus ergibt sich ein stöchiometrischer Luftbedarf  $L_{st}$  von:

$$L_{st} = \left( \frac{0,21 + 0,79}{0,21} \right) O_{2st} = 4,76 O_{2st} \frac{[kmol Luft]}{[kmol Kraftstoff]}$$

#### 2.1.2 Schadstoffbildung in Verbrennungskraftmaschinen

Idealerweise entstehen bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffe die Produkte Kohlendioxid und Wasser, der in der Luft befindliche Stickstoffanteil reagiert dabei nicht. Bei der motorischen Verbrennung kommt es jedoch nicht zu einer vollständigen Umsetzung des eingesetzten Brennstoffes, die dabei entstehenden unvollständigen Verbrennungsprodukte sind maßgeblich vom Luftverhältnis  $\lambda$

abhängig und somit auch von der Verbrennungstemperatur. In Abb. 2-1 sind die Bereiche der Ruß-Bildung und -Oxidation dargestellt. Außerdem zeigt Abb. 2-2 die Verläufe der Schadstoffe über das globale Luftverhältnis. Mit steigendem Lambda sinkt die Verbrennungstemperatur und damit die  $NO_x$ -Emissionen, wohingegen ein höheres Lambda generell auch eine bessere Ruß-Oxidation bewirkt. Aufgrund der geringeren Verbrennungstemperaturen mit steigendem Luftüberschuss kommt es zu einem Anstieg der  $CO$ - und  $HC$ -Emissionen.

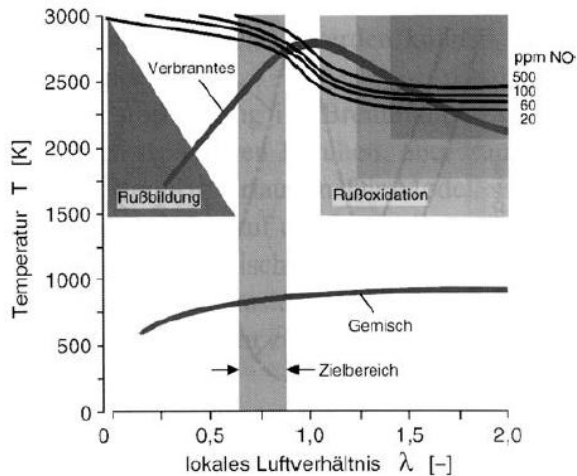


Abb. 2-1; Rußbildung und -oxidation bei der dieselmotorischen Verbrennung [6]

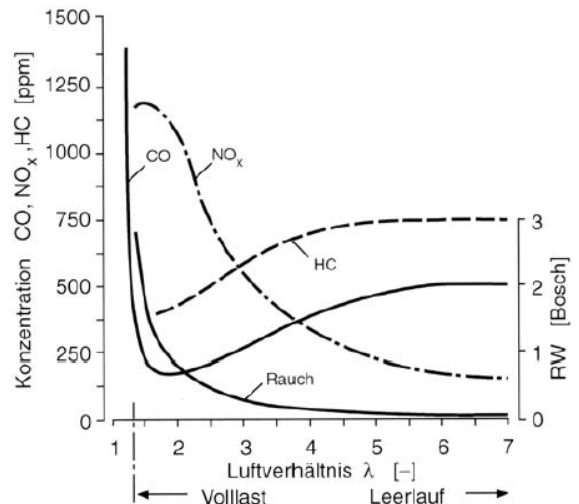


Abb. 2-2; Schadstoffbildung im Dieselmotor über Luftverhältnis [6]

### 2.1.3 Zusammensetzung des Rohabgases

Die Rohemissionen bei Diesel- und Otto-Motoren setzen sich aus erwünschten und unerwünschten Komponenten zusammen. Zu den erwünschten Emissionen zählt man Kohlendioxid  $CO_2$ , Wasserdampf  $H_2O$ , aus der Zylinderfüllung stammender Stickstoff  $N_2$  und dem Restsauerstoff  $O_2$ . In der Praxis kommen neben den erwünschten Verbrennungsprodukten auch unerwünschte vor, wie Kohlenmonoxid  $CO$ , Stickoxide  $NO_x$ , unverbrannte Kohlenwasserstoffe  $HC$  und Ruß bzw. Partikel. Zudem kommt es bei schwefelhaltigen Kraftstoffen auch noch zur Bildung unerwünschter Schwefelverbindungen. In Abb. 2-3 ist eine generelle Aufteilung der Rohemissionen, sowie Schadstoffe für einen Diesel- und Otto-Motor dargestellt. Unter den Partikelemissionen des Diesel-Motors werden Sulfate, Feststoffe und Aldehyde zusammengefasst. Im Vergleich zum Diesel- produziert der Otto-Motor etwa um den Faktor 10 höhere Schadstoffemissionen. Aufgrund des  $\lambda=1$  Betriebs vereinfacht sich die Abgasnachbehandlung für den Otto-Motor wesentlich durch den Einsatz eines Drei-Wege-Katalysators. Dagegen stellt der Diesel-Motor erhöhte Anforderungen an die Abgasnachbehandlung.

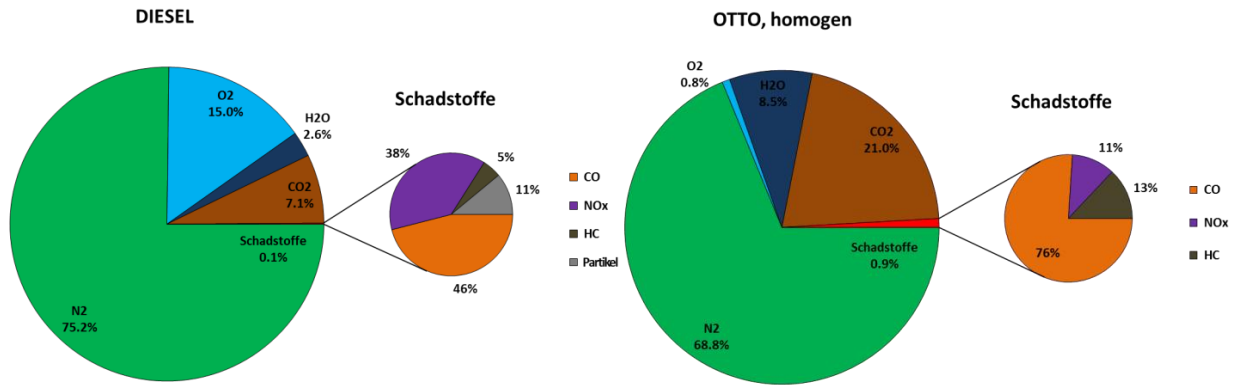


Abb. 2-3; Rohemissionen Diesel (links) und Rohemissionen Otto homogen (rechts) [17]

### CO<sub>2</sub>, Kohlendioxid

Kohlendioxid ist ein erwünschtes Produkt der vollständigen Verbrennung. Das Gas ist farb- und geruchslos und kommt in der Luft mit einer durchschnittlichen Konzentration von 400ppm vor. Ein Teil des CO<sub>2</sub> entsteht durch Oxidation von Kohlenmonoxid bei Verbrennungsvorgängen, wobei ein Großteil des Kohlendioxids durch Verrottungsvorgänge und den Atmungsprozess entsteht. Neben den genannten Quellen gibt es verschiedene Senken in denen das CO<sub>2</sub> gebunden oder/und umgewandelt wird. Unter anderem tragen als Senken die Photosynthese, Einlagerungen in Sedimenten und Ozeane bei [20].

Durch den stetig steigenden Bedarf an fossilen Brennstoffen stieg seit Beginn der Industrialisierung die Kohlendioxidkonzentration in der Atmosphäre deutlich an. Da Kohlendioxid ein hochwirksames Treibhausgas ist, hat die steigende CO<sub>2</sub>-Konzentration in der Atmosphäre Einfluss auf die Temperatur der Erdoberfläche. Jährlich nimmt die Kohlendioxidkonzentration in der Atmosphäre um mehr als 1ppm zu. Es gibt verschiedene Prognosen wie sich das Klima bis 2100 ändern wird. Je nach Randbedingungen wird ein Temperaturanstieg von 0.5 bis 4K prognostiziert. Das überschreitet eine Grenztemperaturerhöhung pro 100 Jahre von 0.1K. Über diese Grenze hinaus wird es für die Vegetation schwierig den Verschiebungen der Klimazonen zu folgen, laut Einschätzung der IPCC (Intergovernmental Panle on Climate Change).

Da Kohlendioxid ein erwünschtes Produkt der Verbrennung ist, kann eine Reduktion nur durch eine Senkung des Kraftstoffeinsatzes oder Verwendung von CO<sub>2</sub> neutralen Kraftstoffen erzielt werden. In Abb. 2-4 ist die CO<sub>2</sub>-Aufstellung eines Verbrennungsmotors und eines Elektromotors für eine Automobilanwendung dargestellt. Um eine genaue Aussage der CO<sub>2</sub>-Emissionen formulieren zu können, muss dafür das gesamte Umfeld betrachtet werden, also von „Well To Wheel“ (von der Quelle zum Reifen). Diese Bilanz ist für Elektrofahrzeuge sehr unterschiedlich, da je nach Land die Stromproduktion aus einem unterschiedlichen Mix aus fossilen und erneuerbaren Energieträger entsteht.

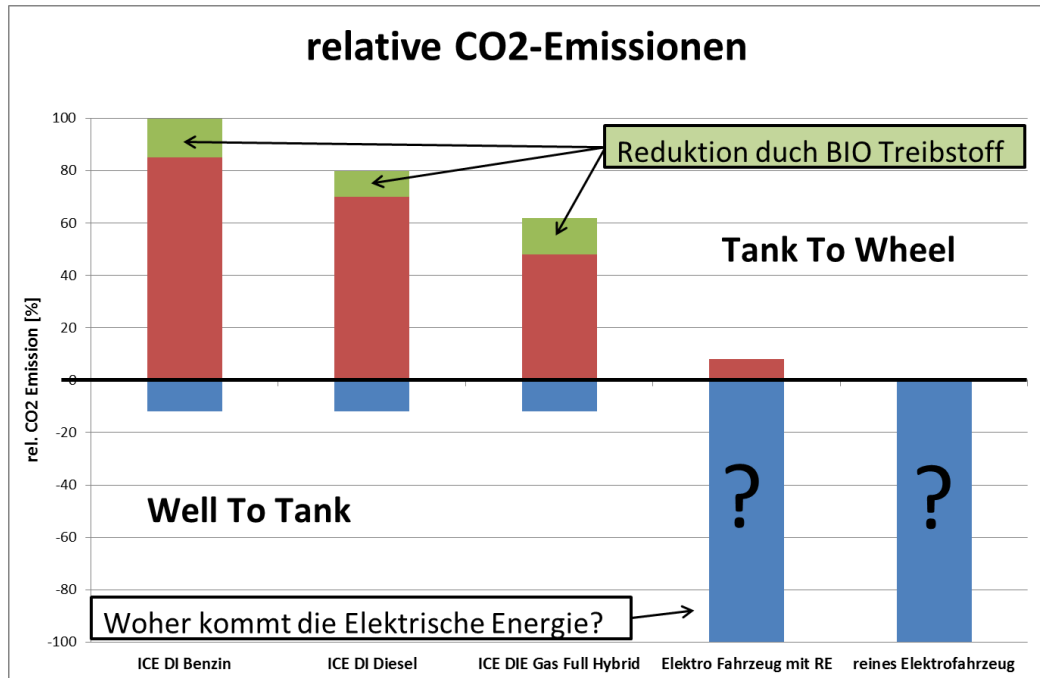


Abb. 2-4; Vergleich CO<sub>2</sub>-Emissionen verschiedener Antriebskonzepte [20]

### CO, Kohlenmonoxid

Kohlenmonoxid ist ein Produkt der unvollständigen Verbrennung, welches typischerweise bei der Verbrennung im Luftmangelbereich entsteht. Des Weiteren tritt es in stabiler Form auch bei höheren Temperaturen auf. Bei der Methanoxidation in der Atmosphäre entsteht ebenfalls CO [20].

Kohlenmonoxid ist ein farb- und geruchsloses Gas, das als hoch giftig eingestuft wird, da es im Vergleich zum Sauerstoff eine wesentlich festere Bindung mit Hämoglobin eingeht. Das CO reichert sich in Form von COHb stark im Blut an und dadurch fällt die Sauerstoffsättigung ab. Organe die eine hohe Sauerstoffsättigung benötigen, wie Gehirn und Herz, werden dadurch beeinträchtigt. Die Auswirkung auf das Klima ist durch das Kohlenmonoxid im Vergleich zu anderen Schadstoffen gering.

Zu beachten ist, dass die CO-Oxidation eine gewisse Zeit benötigt. Diese Forderung kann für Verbrennungskraftmaschinen prinzipbedingt nicht erfüllt werden. Zusätzlich muss darauf geachtet werden, dass Bereiche des Luftmangels vermieden werden. Hieraus ergibt sich eine hohe Anforderung an die vollständige Verbrennung und an eine eventuell notwendige Abgasnachbehandlung.

### NO<sub>x</sub>, Stickoxide

Die Entstehung von Stickoxiden ist einerseits bedingt durch Hochtemperaturvorgänge und andererseits durch Oxidationsprozesse von stickstoffhaltigen Verbindungen. In den Industrieländern überwiegen die anthropogenen Stickoxidemissionen bei Weitem natürliche. Durch den Düngemittelseinsatz in der Landwirtschaft entstehen große Mengen an den Vorläufersubstanzen Lachgas N<sub>2</sub>O und Ammoniak NH<sub>3</sub>.

Zu unterscheiden ist bei den NO<sub>x</sub>-Emissionen das Stickstoffmonoxid NO und das Stickstoffdioxid NO<sub>2</sub>. NO ist ein farb- und geruchsloses Gas, wohingegen das NO<sub>2</sub> ein braunes Gas mit einem beklemmenden Geruch ist. Das emittierte NO wird durch UV-Strahlung zu einem großen Teil in NO<sub>2</sub> umgewandelt, welches ein hochgiftiges Reizgas ist. Eine Eigenschaft vom NO<sub>2</sub> ist eine geringe Wasserlöslichkeit, dass dadurch tief in die Lungenperipherie eindringen und dort wirksam werden kann. Folgen der erhöhten

Stickstoffdioxidbelastung sind ein erhöhtes Infektionsrisiko und Beeinträchtigung der Lungenfunktion. Eine weitere Auswirkung vom Stickstoffdioxid ist die Ozonbildung in der Troposphäre. Durch Strahlungseinwirkung trennt sich ein Sauerstoffatom vom  $NO_2$  und bildet somit ein Radikal, das mit einem Sauerstoffmolekül durch die Fotolyse ein Ozon-Molekül bildet. An einem sonnigen Tag kann diese Reaktion bis zu 200-mal ablaufen und somit zu einer erhöhten Ozonkonzentration in der Troposphäre führen, den sogenannten Sommersmog.

Hauptquellen für Stickoxidemissionen sind Verkehr und Großfeuerungsanlagen, da diese mit hohen Verbrennungstemperaturen und Luftüberschuss betrieben werden. In Großfeuerungsanlagen kann über eine gestufte Verbrennung die  $NO_x$ -Emissionen reduziert werden. Unter einer gestuften Verbrennung versteht man eine Aufteilung der Verbrennung in mehrere Zonen. Im ersten Bereich läuft die Verbrennung im Luftmangelbereich ab, damit wird wenig  $NO$  gebildet. Der zweite Bereich läuft mit Luftüberschuss ab, damit wird die Spitztemperatur reduziert und weniger  $NO_x$  gebildet. In Verbrennungskraftmaschinen sind die  $NO_x$ -Emissionen höher als in Feuerungsanlagen, da aufgrund der hohen Verdichtung höhere Verbrennungstemperaturen erzielt werden. Bei Verbrennungskraftmaschinen gilt für die konventionelle Verbrennung ein  $NO_x$ -Soot-Trade-Off. Dieser Trade-Off beschreibt den Zusammenhang von  $NO_x$ - und Soot-Emissionen.

Es gibt einige technische Maßnahmen bei Verbrennungskraftmaschinen mit denen  $NO_x$ -Emissionen reduziert werden können. Entweder man reduziert die Verbrennungstemperaturen (Kühlung der Ladeluft, Einspritzung nach später stellen, Abgasrückführung EGR, Gekühltes EGR... ) oder verändert den Verbrennungsablauf (längere Einspritzperiode, Erhöhung der Cetanzahl, Reduktion der Einspritzrate... ).

### **HC, Kohlenwasserstoffe**

Der Sammelbegriff *HC* beinhaltet flüchtige organische Substanzen, die durch Verarbeitungsprozesse und Rohstoffe aus Naturprodukten sowie in Kunststoffen entstehen [20]. Da in Diesel- und Ottokraftstoffen Kohlenwasserstoffe enthalten sind, beinhaltet das Abgas ebenfalls *HC*. Bei Verbrennungskraftmaschinen kann eine Einteilung der *HC*-Herkunft in zwei Bereiche gemacht werden:

- *HC*-Emissionen direkt aus dem Kraftstoff (fuel-Emissionen)
- *HC*-Emissionen nicht aus dem Kraftstoff (non-fuel-Emissionen), z.B. Schmierstoffe.

Es gibt einige Kohlenwasserstoffverbindungen, die eine gesundheitsschädliche Wirkung auf den Menschen haben (polyzyklischen Aromaten, *PAH*), daneben gibt es aber auch *HC*-Verbindungen, die für den Menschen unschädlich sind (z.B. Alkanen). In Kombination mit Stickoxiden und Sonneneinstrahlung können schleimhautreizende organische Verbindungen entstehen, welche die Entstehung des Sommersmogs fördern.

Beim Diesel-Motor hatten die *HC*-Emissionen in der Vergangenheit eine untergeordnete Bedeutung, jedoch durch die Low- $NO_x$ -Verbrennung im Niedriglastbereich nimmt deren Bedeutung zu. Der Einfluss der Kohlenwasserstoffe unterscheidet sich für NFZ- und PKW-Motoren. Aufgrund des höheren Lastkollektives und der größeren spezifischen Oberfläche für NFZ-Motoren kommt es bei den *HC*-Emissionen zu keinen gravierenden Problemen. Für PKW-Motoren steigen die *HC*-Emissionen bei sinkenden  $NO_x$ -Emissionen auf ein hohes Niveau an. Grund dafür ist die spezifische Oberfläche, die im Vergleich mit NFZ-Motoren viel kleiner ist, denn damit ist die Verbrennung schwieriger zu kontrollieren. Die erhöhten *HC*-Emissionen sind durch den gestiegenen *CH<sub>4</sub>*-Anteil besonders kritisch, da aufgrund der geringen Abgastemperaturen der Diesel-Oxidationskatalysator nur geringe Mengen an Methan konvertieren kann. Um *CH<sub>4</sub>* umsetzen zu können, sind höhere Temperaturen erforderlich [24].

Besonders deutlich treten erhöhte HC-Emissionen im Kaltstart auf, somit kommt dem Brennverfahren eine große Bedeutung zu.

### Partikel- und Rußemissionen

Die anthropogenen Partikelemissionen stammen aus unterschiedlichen Quellen. Hinsichtlich toxischer und klimatischer Auswirkungen spielen nur wenige Emittenten eine Rolle, unter anderem auch der Straßenverkehr, der nur etwa 20% zu den Gesamtpartikelemissionen beiträgt. Die Entstehung von Rußpartikeln ist ein sehr komplexer Prozess, der von vielen Parametern abhängt. Bei der motorischen Verbrennung gibt es verschiedene Quellen, die für die Partikelemissionen ausschlaggebend sind [20]:

- Kraftstoff-Zusammensetzung
- Ölverbrauch
- Gemischbildung.

In welchem Ausmaß die anthropogenen Partikel Einfluss auf die Umwelt haben, ist derzeit noch nicht genau erfasst, wohingegen auf den Menschen gesundheitsschädliche Auswirkungen bekannt sind. Die Ursache liegt darin, dass Rußpartikel als Träger von teilweise krebserregenden Stoffen dienen und nicht vollständig vom menschlichen Atmungsorgan abgeschieden werden können (Abb. 2-5).

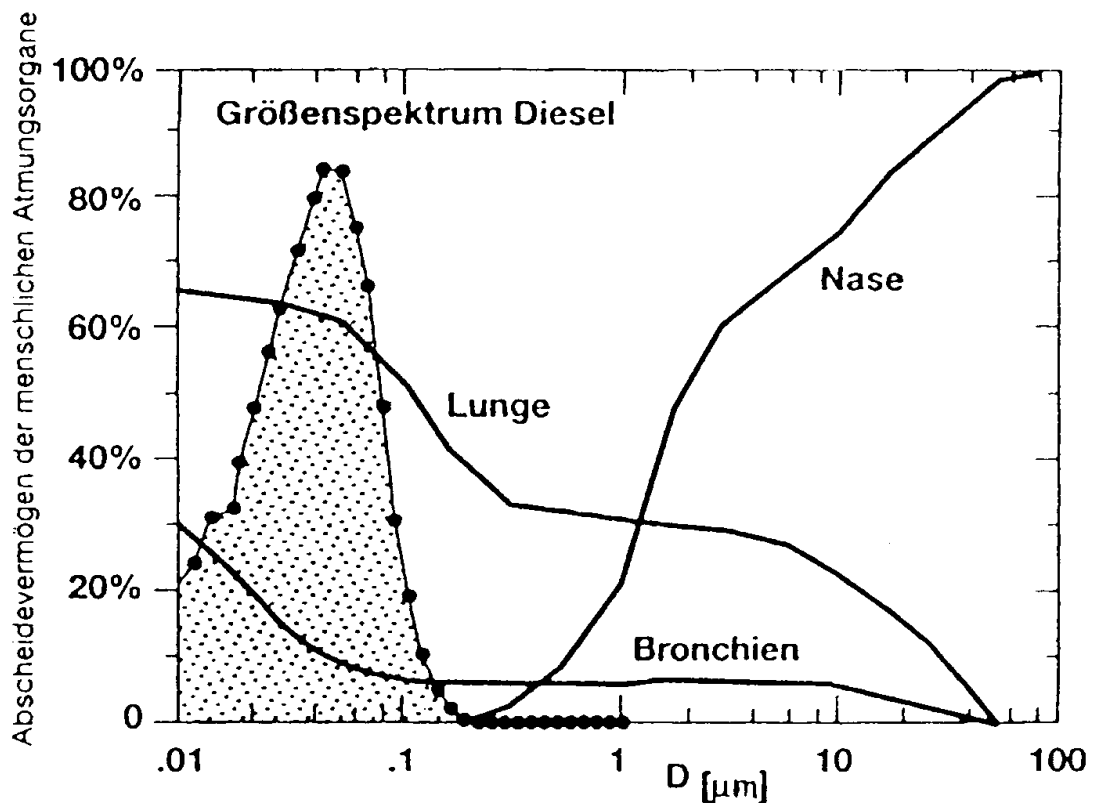


Abb. 2-5; Abscheidevermögen der menschlichen Atmungsorgane [20]

Diese krebserregenden Stoffe bestehen hauptsächlich aus polyzyklischen Aromaten (Poly-Aromatic-Hydrocarbons PAH) und aus Spurenstoffen resultierenden Verbrennungsprodukten. Aufgrund der schwierig zu charakterisierenden Eigenschaften der Partikel sind die Schädigungsmechanismen auf den menschlichen Körper noch unklar.

## 2.1.4 Gesetzliche Limitierungen der Schadstoffemissionen

Ausgehend von Kalifornien wurden erstmals Abgase aus dem Straßenverkehr limitiert. Anstoß dafür war der Smog und die damit verbundene schlechte Luftqualität. Europa veranlasste erst einige Jahre später Abgasvorschriften für den Verkehr. Heutzutage findet man in jedem Industrieland Gesetze, die Schadstoffemissionen aus dem Verkehr limitieren, dafür sind die europäische und kalifornische Gesetzgebung maßgeblich.

Die Emissionsmessungen für den PKW werden auf einem Rollenprüfstand, unter einer genau definierten Testprozedur, durchgeführt. Je nachdem welche Gesetzgebung gefordert ist, werden unterschiedliche Vorgehensweisen und zusätzlich unterschiedliche Testzyklen vorgeschrieben [15]. Für den Europäischen Bereich wird derzeit der „New European Driving Cycle“ (NEDC), in Nordamerika der „Federal Test Procedure“ (FTP75) und in Japan der „Chassies dynamometer Test Cycle“ (JC08den) als Testzyklus eingesetzt [25]. Zukünftig soll ein einheitlicher Fahrzyklus und eine Messprozedur für die Abgasgesetzgebung PKW verwendet werden, den WLTP-Zyklus (Worldwide Harmonized Light Duty Test Procedure), dieser soll voraussichtlich bis Ende 2013 in Kraft treten.

In Tab. 2-1, Tab. 2-2 und Tab. 2-3 ist die Entwicklung der Abgasgesetzgebungen für EU- und US-PKW-Bereich dargestellt [25].

Abgasnorm	Typprüfung, gültig ab	Diesel PKW						Otto PKW					
		CO	HC	NO <sub>x</sub>	HC + NO <sub>x</sub>	PM	PN	CO	HC	NO <sub>x</sub>	HC + NO <sub>x</sub>	PM	PN
		[g/km]	[g/km]	[g/km]	[g/km]	[g/km]	[-]	[g/km]	[g/km]	[g/km]	[g/km]	[g/km]	[-]
Euro 1	1.7.1992	3.16	-	-	1.13	0.18	-	3.16	-	-	1.13	-	-
Euro 2	1.1.1996	1	-	-	0.7	0.08	-	2.2	-	-	0.5	-	-
Euro 2 <sup>a</sup>	1.1.1996	1	-	-	0.9	0.1	-						
Euro 3	1.1.2000	0.64	-	0.5	0.56	0.05	-	2.3	0.2	0.15	-	-	-
Euro 4	1.1.2005	0.5	-	0.25	0.3	0.025	-	1	0.1	0.08	-	-	-
Euro 5a	1.9.2009	0.5	-	0.18	0.23	0.005	-	1	0.1	0.06	-	0.005	-
Euro 5b	1.9.2011	0.5	-	0.18	0.23	0.005	6x10 <sup>-11</sup>						
Euro 6	1.9.2014	0.5	-	0.08	0.17	0.005	6x10 <sup>-11</sup>	1	0.1	0.06	-	0.005	6x10 <sup>-11</sup>

<sup>2</sup> für Diesel direkteinspritzer Motoren

a ohne Partikelanzahl, PN

b mit Partikelanzahl, PN

**Tab. 2-1;** EU-Abgasgrenzwerte für die PKW-Anwendung

Abgasnorm	Emissionlimits bei 50.000 miles / 5 Jahre						Emissionlimits bei 120.000 miles (Lebensdauer)					
	CO	NMOG	NO <sub>x</sub>	NMOG+NO <sub>x</sub>	PM	HCHO	CO	NMOG	NO <sub>x</sub>	NMOG+NO <sub>x</sub>	PM	HCHO
	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]
Bin 11	5	0.19	0.6	0.79	-	0.022	7.3	0.28	0.9	1.18	0.12	0.032
Bin 10	3.4	0.125	0.4	0.525	-	0.015	4.2	0.56	0.6	1.16	0.08	0.018
Bin 9	3.4	0.075	0.2	0.275	-	0.015	4.2	0.09	0.3	0.39	0.06	0.018
Bin 8	3.4	0.1	0.14	0.24	-	0.015	4.2	0.125	0.2	0.325	0.02	0.018
Bin 7	3.4	0.075	0.11	0.185	-	0.015	4.2	0.09	0.15	0.24	0.02	0.018
Bin 6	3.4	0.075	0.08	0.155	-	0.015	4.2	0.09	0.1	0.19	0.01	0.018
Bin 5	3.4	0.075	0.05	0.125	-	0.015	4.2	0.09	0.07	0.16	0.01	0.018
Bin 4	-	-	-	-	-	-	2.1	0.07	0.04	0.11	0.01	0.011
Bin 3	-	-	-	-	-	-	2.1	0.055	0.03	0.085	0.01	0.011
Bin 2	-	-	-	-	-	-	2.1	0.01	0.02	0.03	0.01	0.004
Bin 1	-	-	-	-	-	-	0	0	0	0	0	0

**Tab. 2-2;** Nordamerikanische Abgasgrenzwerte Tier2 für die PKW-Anwendung

Abgasnorm	Emissionlimits bei 50.000 miles / 5 Jahre						Emissionlimits bei 120.000 miles / 11 Jahre					
	CO	NMOG	NO <sub>x</sub>	NMOG+NO <sub>x</sub>	PM	HCHO	CO	NMOG	NO <sub>x</sub>	NMOG+NO <sub>x</sub>	PM	HCHO
	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]	[g/mi]
LEV	3.4	0.075	0.05	0.125	-	0.015	4.2	0.09	0.07	0.16	0.01	0.018
ULEV	1.7	0.04	0.05	0.09	-	0.008	2.1	0.055	0.07	0.125	0.01	0.011
SULEV	-	-	-	-	-	-	1	0.01	0.02	0.03	0.01	0.004
ZEV	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tab. 2-3; Kalifornischen Abgasgrenzwerte LEVII für die PKW-Anwendung

## 2.2 Abgasnachbehandlung

Aufgrund der gesetzlichen Randbedingungen ist es notwendig die emittierten Schadstoffkomponenten zu reduzieren. Um dieser Forderung nachkommen zu können, gibt es unterschiedliche Maßnahmen. Grundlegend kann man zwei Herangehensweisen unterscheiden:

- Innermotorische Maßnahmen
- Externe Maßnahmen (Abgasnachbehandlung).

Die innermotorischen Maßnahmen befassen sich mit der Reduktion der Schadstoffkomponenten durch die Verbrennung, die im Wesentlichen Verbesserungsmaßnahmen des Brennverfahrens umfassen. Dafür ist eine Optimierung der Einlasskanäle, der Brennraumgeometrie und des Einspritzsystems, etc. erforderlich. Ziel ist es ein möglichst homogenes Gemisch aus Luft und Kraftstoff zu erreichen. Eine weitere Möglichkeit ist der Einsatz von rückgeführtem Abgas (AGR), damit ist eine deutliche Reduktion der NO<sub>x</sub> Rohemissionen möglich. Das Abgas kann extern über ein System vor oder nach dem Verdichter/Kompressor (Niederdruck/Hochdruck-AGR) der Frischluftmasse beigemischt werden. Eine andere Möglichkeit AGR dem Brennraum zuzuführen, ist die Ausnutzung der Gasdynamik während des Ladungswechselvorgangs. Dabei wird durch passende Steuerzeiten von Ein- und Auslassventil ein Rückströmen des Abgases in den Brennraum erzwungen bzw. der Restgasgehalt im Zylinder groß gehalten. Es gibt noch weitere Möglichkeiten die Emissionen innermotorisch zu reduzieren [6][20].

Als Zweites sind externe Maßnahmen genannt, dabei werden die Schadstoffe durch eine externe Nachbehandlung reduziert. Diese Reduktion ist generell von unterschiedlichen Parametern abhängig, wie z.B. Temperatur und Zusammensetzung des Rohabgases, Druck im System, verwendetes katalytisches Material, Art des Trägermaterials, Zelldichte usw. Aufgrund der dieseltypischen Verbrennung ( $\lambda > 1$ , innere Gemischbildung) ist die Abgasnachbehandlung ein wichtiges und umfangreiches Thema.

### 2.2.1 Katalytische Reaktion

Damit eine Reaktion ablaufen kann, ist ein bestimmter Energiebetrag notwendig, welcher als Mindestenergiebetrag mit Aktivierungsenergie  $E'_a$  bezeichnet. Es gibt eine Vielzahl an möglichen Reaktionen, die durch eine hohe Aktivierungsenergie gehemmt werden und dadurch nur sehr langsam ablaufen. Durch den Zusatz eines Katalysators werden die benötigten Aktivierungsenergien stark reduziert und die Reaktionsgeschwindigkeit steigt an. Zu den Katalysatoren zählen neben den Edelmetallen wie Pt, Rh, Pd auch Fe, Co, Ni, Cu, Ag, V, Cr, Mo [19]. Der schematische Ablauf einer nicht-katalytischen im Vergleich zu einer katalytischen Reaktion ist in Abb. 2-6 gezeigt. Die Reaktion mit dem Katalysator K läuft über zwei Stufen mit den beteiligten Ausgangsstoffen A und B ab. Zuerst reagiert K mit A in einer Zwischenstufe, damit wird A aktiviert. Nachdem der aktivierte Ausgangsstoff



KA mit B reagiert ist, wird die Zwischenbildung zu K wieder gelöst. Der Katalysator wird bei der Reaktion nicht verbraucht und scheint in der Bruttoreaktionsgleichung nicht auf.

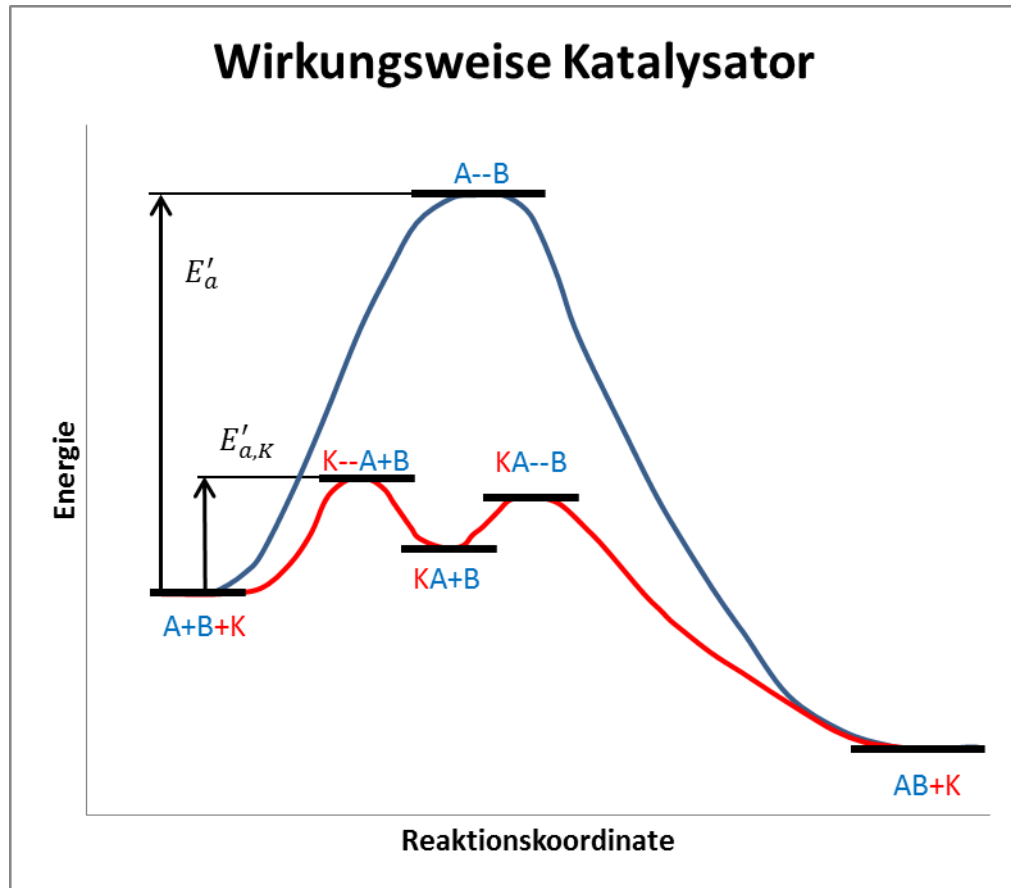
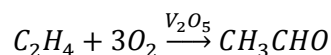
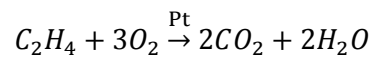


Abb. 2-6; Aktivierungsenergie mit und ohne Katalysator

Zusätzlich weisen Katalysatoren eine Selektivität bzw. eine bevorzugte Produktbildung auf. Das kommt dadurch zu Stande, dass in Abhängigkeit des Katalysators immer bestimmte Reaktionen bevorzugt werden, da die notwendige Aktivierungsenergie geringer ist. Unter Selektivität versteht man das Verhältnis zwischen den bevorzugt ablaufenden Reaktionen zu der Anzahl an parallel möglich ablaufenden Reaktionen. Für Prozessabläufe in der Industrie wird die Selektivität in Prozent angegeben. Je höher die Selektivität eines Katalysators unter Prozessbedingungen ist, desto günstiger ist er [19], z.B. betrachtet man die Oxidation von  $HC$  eines PKW-Abgases ( $C_2H_4$ ), wenn der Katalysator  $Pt$  und Vanadium Pentoxide  $V_2O_5$  eingesetzt wird.



Für  $Pt$  liegt die Selektivität bei 100% zu  $CO_2$  und  $H_2O$ , wobei für  $V_2O_5$  die Selektivität zu  $CO_2$  und  $H_2O$  nur bei etwa 10-20% liegt. Bevorzugt wird die Bildung von Aldehyden, da eine geringere Aktivierungsenergie für diese Reaktion erforderlich ist (Selektivität 80-90%) [19].

## 2.2.2 Abgasmachbehandlungssysteme

Es gibt unterschiedliche Abgasmachbehandlungssysteme die in heutigen Diesel- und Otto-PKW-Anwendungen eingesetzt werden. Darunter findet man:

- TWC, Drei-Wege-Katalysator
- DOC, Diesel-Oxidationskatalysator
- DPF, Diesel-Partikelfilter
- SCR, Selective-Catalytic-Reduktion
- $NO_x$ -Speicherkatalysator, NSC  $NO_x$ -Storage-Catalyst oder LNT Lean- $NO_x$ -Trap

Generell ist zwischen Katalysatoren und Filtern zu unterscheiden.

### Katalysatoren

Ein Abgaskatalysator ist grundlegend aus 5 Teilen aufgebaut (Abb. 2-7):

- Gehäuse, auch Canning genannt
- Zwischenschicht, bestehend aus Matte oder Drahtgeflecht, damit werden auftretende Wärmedehnungen ausgeglichen, dient bei Keramik als Dämpfungsschicht.
- Träger, entweder ein Monolithe (Keramik) oder ein Metallträger.
- Zwischenschicht-Washcoat; durch den Washcoat wird die Oberfläche des Trägers um ein Vielfaches vergrößert.
- Katalytisch aktive Schicht; auf dem Washcoat werden die katalytisch aktiven Substanzen in Form von kleinen Partikeln aufgetragen.

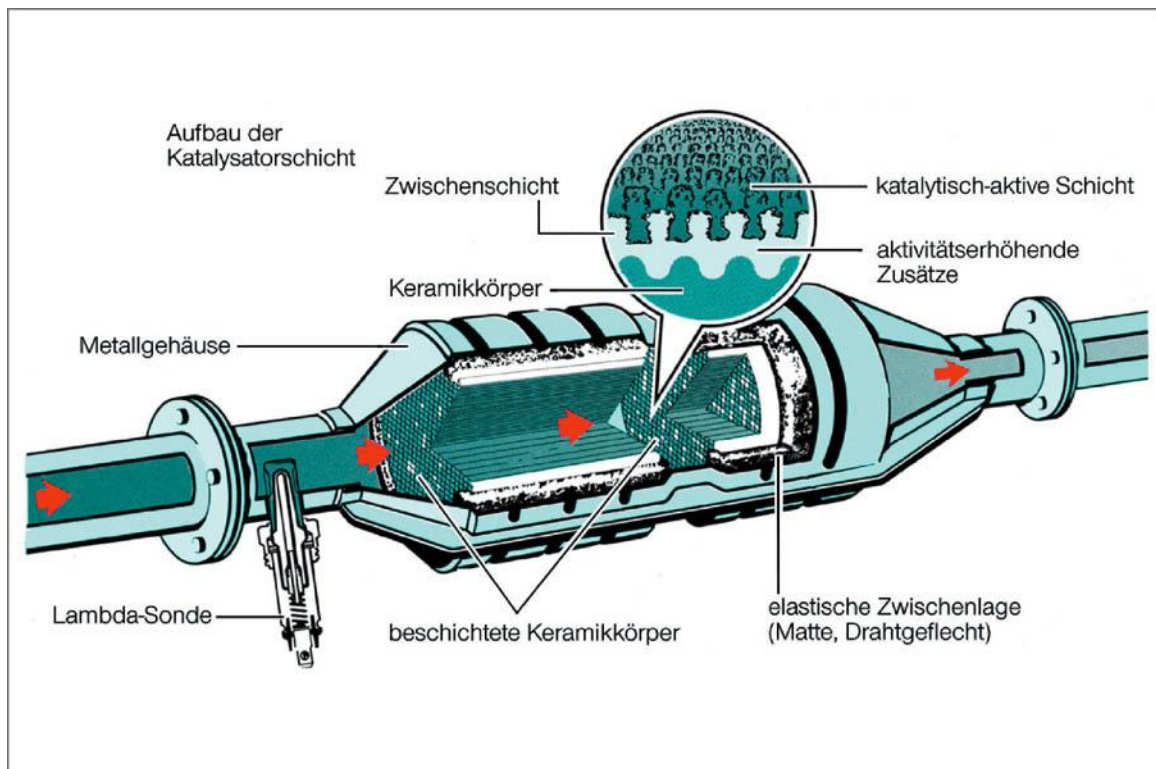


Abb. 2-7; Aufbau eines Abgaskatalysators [26]

Der Träger besteht aus einer Vielzahl an Kanälen, in denen das Abgas strömt. Die Anzahl an Kanälen wird durch die Zellenanzahl in cpsi (Zellen pro Quadratzoll) angegeben. Damit der

Strömungswiderstand über den Träger möglichst klein gehalten wird, muss die Wandstärke entsprechend dünn sein. Für einen Keramik-Träger werden heutzutage Zelldichten von bis zu 1200cpa und Wandstärken von 0.06mm (2.5mil) erreicht. Bei Metall-Trägern lassen sich bereits Wandstärken von 0.04mm (1.5mil) bei einer Zelldichte von 1600cpa erreichen. Aufgrund der thermischen Wechselbelastung und den Erschütterungen wird eine hohe thermische und mechanische Festigkeit gefordert [6][19].

Auf den Träger wird eine Zwischenschicht (Washcoat) aufgetragen um die Oberfläche zu vergrößern (bei  $Al_2O_3$  um bis zu 80000-mal). Neben Aluminiumoxid  $Al_2O_3$  werden unterschiedliche Zeolithe, Titandioxid  $TiO_2$ , Siliziumdioxid  $SiO_2$ , Zirkoniumoxid  $ZrO_2$  und Ceroxid  $CeO_2$  verwendet. Zirkoniumoxid und Ceroxid wird bei Drei-Wege-Katalysatoren eingesetzt, da sie eine ausgeprägte Sauerstoffspeicherfähigkeit besitzen. Für jede dieser genannten Verbindungen ergeben sich typische Porendurchmesser und Porositäten [19]. Je nach Anforderung wird eine katalytisch aktive Substanz auf den Washcoat aufgetragen. Diese Substanzen befinden sich in Form von kleinen Partikeln in den Poren der Zwischenschicht [10].

Im Kanal eines Katalysators wird zwischen Gasphase, Grenzschicht, Poren des Washcoats und aktive Zentren der Katalysatoroberflächen unterschieden. Dabei hängt die Funktion von vielen chemischen und physikalischen Vorgängen ab (Abb. 2-8):

1. Diffusionsvorgang der Edukte durch die Grenzschicht → Wandfilmdiffusion
2. Diffusionsvorgang der Edukte in die Poren der aktiven Katalysatoroberfläche → Porendiffusion
3. Chemisorption einer oder mehrerer Reaktionspartner an den katalytisch aktiven Zentren der Oberfläche
4. Oberflächenreaktion zwischen den chemisorbierten Reaktionspartnern
5. Desorption einer oder mehrerer Reaktionsprodukte an der Katalysatoroberfläche
6. Diffusionsvorgang der Produkte aus den Poren → Porendiffusion
7. Diffusionsvorgang der Produkte aus der Grenzschicht → Wandfilmdiffusion

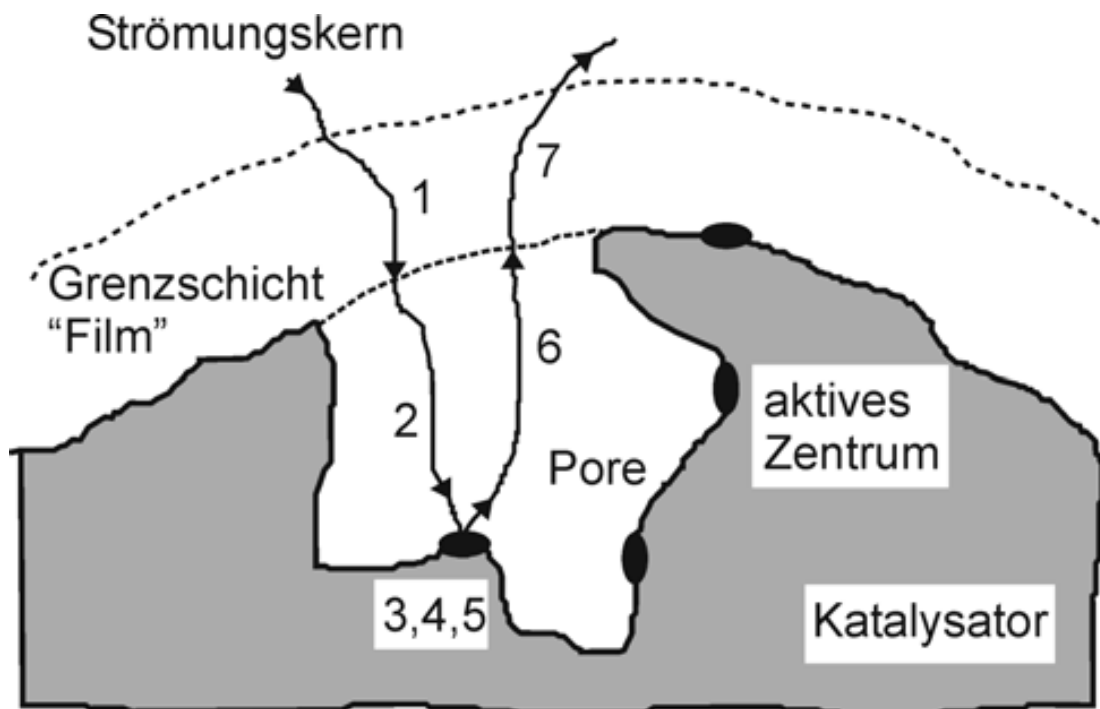


Abb. 2-8; Schematische Darstellung der ablaufenden Schritte einer heterogenen Katalyse [11]

Aus den chemischen und physikalischen Vorgängen sind drei Prozesse maßgeblich:

- Reaktionskinetik, bestimmt durch die Konzentrationen der Reaktionspartner und den katalytischen Substanzen
- Porendiffusion, bestimmt durch die Größe der Poren und Konzentrationsunterschieden
- Wandfilmdiffusion, Transportvorgänge von der Gasphase zu den Poren

In Abb. 2-9 ist eine schematische Darstellung der jeweils limitierenden Prozesse dargestellt. Bei geringen Temperaturen (A-B) begrenzen die chemisch ablaufenden Reaktionen den Umsatz. Mit steigender Temperatur wird der Prozess durch die Porendiffusion limitiert (B-C). Nachdem ein hohes Temperaturniveau erreicht wird, tritt die Wandfilmdiffusion als limitierender Prozess auf (über C) [19].

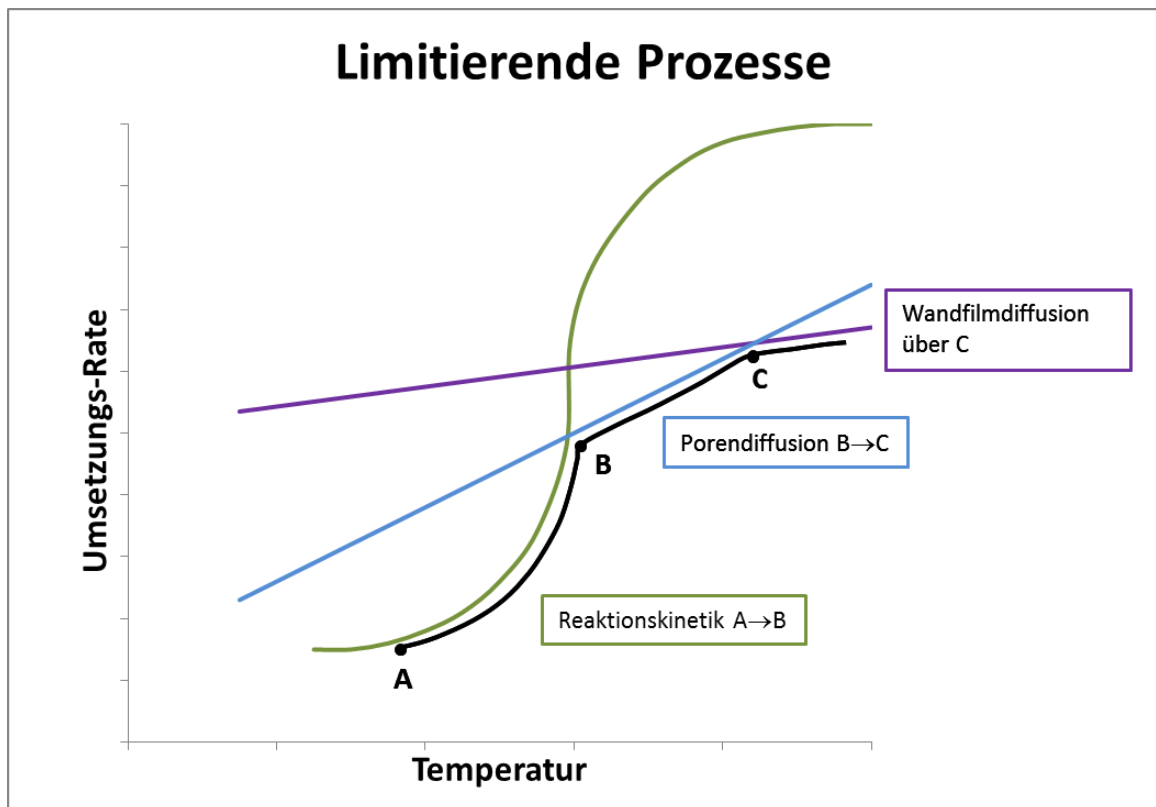


Abb. 2-9; Umsetzungsdaten limitiert durch Kinetik, Poren- und Wandfilmdiffusion-schematisch

## Filter

Der wesentliche Unterschied zwischen Partikelfilter und Katalysator besteht darin, dass die Kanäle bei einem Partikelfilter abwechselnd verschlossen sind, somit muss das Abgas durch die porösen Wände strömen (Abb. 2-10). Neben keramischen Monolith-Filtern gibt es noch Fasergestricke aus Metall oder Keramik. Als Filtermaterial werden unterschiedliche Siliziumcarbide, Cordierit oder Sintermetall eingesetzt [6].

### Funktionsweise des Diesel-Partikelfilters

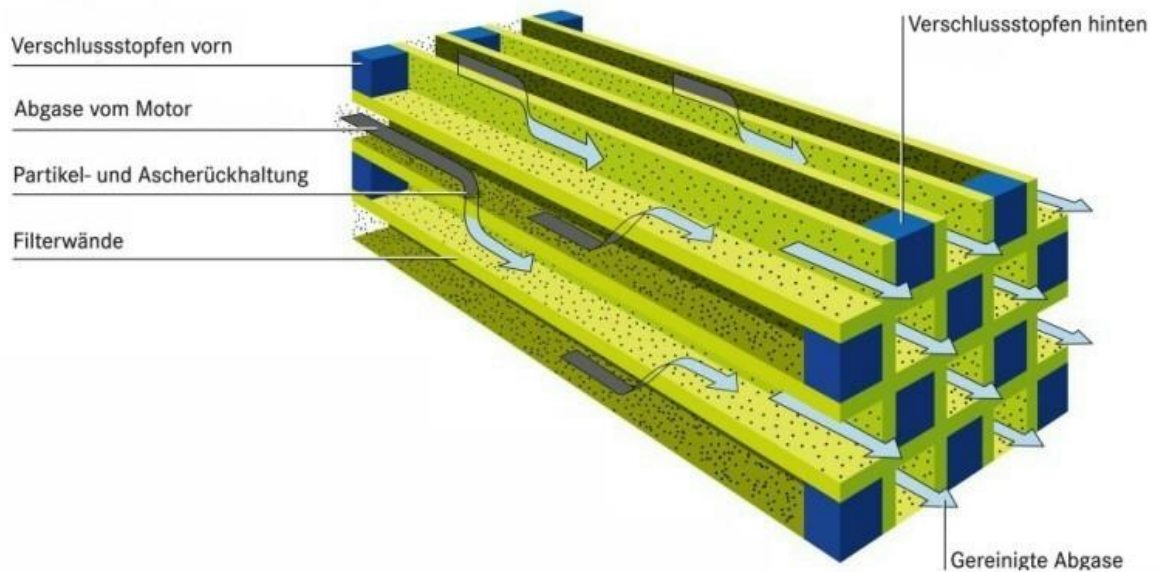


Abb. 2-10; Funktionsweise Partikelfilter [Mercedes]

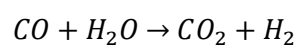
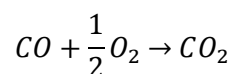
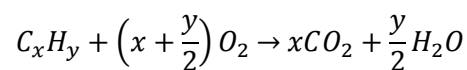
Die Funktionsweise eines Partikelfilters wird grundlegend durch physikalische Grundmechanismen beschrieben [20]:

- Impaktion; große Partikel können aufgrund ihrer Trägheit der Strömung nicht mehr folgen und werden durch Impaktion am Strömungshindernis abgeschieden.
- Interzeption; befinden sich kleinere Partikel auf oder unterhalb der Grenzpartikelbahn, werden sie am Hindernis abgefangen.
- Diffusion, kleinste Partikel (Nanopartikel) werden durch die Brown'sche Diffusionsbewegung abgeschieden.

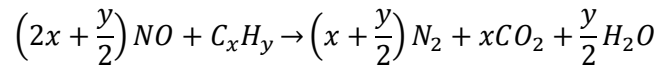
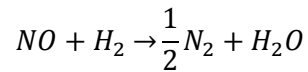
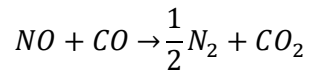
### 2.2.3 Drei-Wege-Katalysator

Der Drei-Wege-Katalysator (TWC) ermöglicht eine Reduzierung der *NO*-Emission und gleichzeitig eine Oxidation der *CO*- und *HC*-Emissionen unter der Voraussetzung einer stöchiometrischen Verbrennung. Durch diese Tatsache kann der moderne Otto-Motor niedrigste Schadstoffemissionen erreichen.

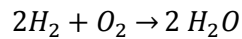
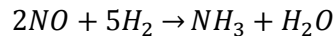
Oxidation von *CO* und *HC*:



Reduktion von  $NO$  durch  $H_2$ ,  $CO$  und  $HC$ :

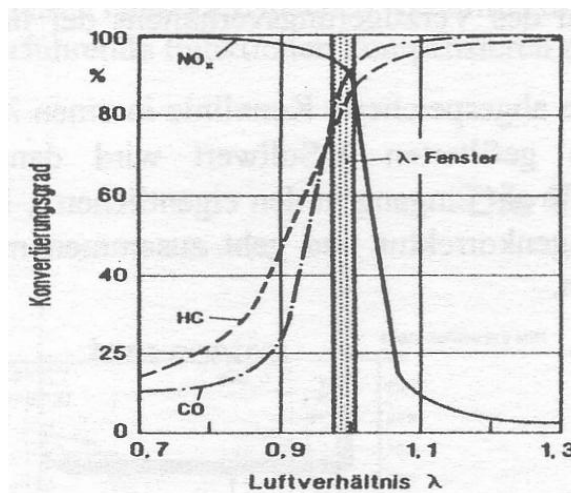


Sonstige Reaktionen:



Wie in Abb. 2-11 abgebildet ist die hohe Konvertierung des TWC an ein enges Lambdafenster gebunden. Daher kommt bei Otto-Motoren ein geregelter Drei-Wege-Katalysator mit Lambdasonde zum Einsatz. Die erreichbaren Konvertierungsraten  $k$  liegen heute bereits über 99% für  $\lambda=1$ .

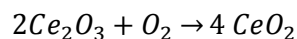
$$k = \frac{\text{Eingangskonzentration} - \text{Ausgangskonzentration}}{\text{Eingangskonzentration}}$$



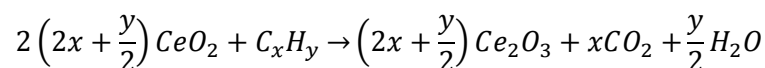
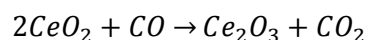
**Abb. 2-11;** Konvertierung der Schadstoffe für Otto-Motoren aufgetragen über das Luftverhältnis[14]

Damit für die Reaktionen an den aktiven Zentren des Katalysators Stöchiometrie vorliegt, ist die Sauerstoffspeicherfähigkeit des Washcoats und der Beschichtung ausschlaggebend. Damit wird sichergestellt, dass bei magerer Verbrennung Sauerstoff eingespeichert wird und bei fetter Verbrennung Sauerstoff aus den Speicherplätzen entnommen wird [1][7].

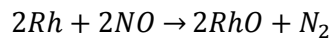
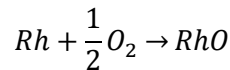
$O_2$ -Speicherfähigkeit von Ceroxid  $CeO_2$ :



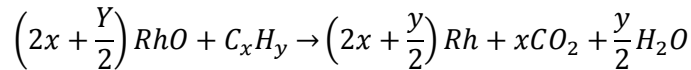
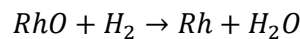
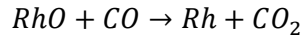
$O_2$ -Abgabe durch  $CO$  und  $HC$ :



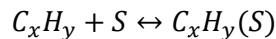
$O_2$ -Speicherfähigkeit von Rhodium:



$O_2$ -Abgabe durch  $H_2$ ,  $CO$  und  $HC$ :



Zusätzlich zur  $O_2$ -Speicherfähigkeit besitzt der TWC eine  $HC$ -Speicherung. Besondere Bedeutung hat die  $HC$ -Speicherung bis zum Anspringen des Katalysators.



Das Anspringverhalten (light-off) des Katalysators ist wesentlich von drei Parametern abhängig. Der Mindestbetriebstemperatur, dem Alterungszustand und der Raumgeschwindigkeit  $RG$  (Spacevelocity).

$$RG = \frac{\text{Volumenstrom}}{\text{Katalysatorvolumen}} \left[ \frac{1}{h} \right]$$

Der Alterungszustand wird durch die auftretenden Temperaturen im Katalysator hervorgerufen, man spricht in diesem Fall auch von thermischer Alterung oder Deaktivierung. Aufgrund der Otto-typischen Verbrennung ( $\lambda=1$ ) werden Abgastemperaturen von bis zu  $1000^\circ\text{C}$  erreicht, durch diese hohen Temperaturen kommt es Sinterungsvorgängen, dabei unterscheidet man generell zwei Bereiche, die eine Verringerung der aktiven Oberfläche verursachen. Bei der ersten Form kommt es zu atomaren und kristallinen Wanderungen der Edelmetallatome. Diese Vorgänge führen zu einem Partikelwachstum. Die zweite Form des Sinterns tritt nur bei sehr hohen Temperaturen auf und bewirkt eine Phasenumwandlung des Aluminiumoxid  $Al_2O_3$ , welches im Washcoat enthalten ist. Durch die Phasenumwandlung kommt es zum Porenverschluss und damit zum Verschluss der darin enthaltenen katalytisch aktiven Partikel. Sogenannte Stabilisatoren wie Barium  $Ba$  oder Zirconiumoxid  $ZrO_2$  verhindern die Phasenumwandlung von  $Al_2O_3$ , deshalb spielt dieser Sinterungsvorgang nur eine untergeordnete Rolle der thermischen Alterung [7].

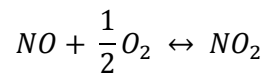
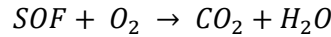
Neben der thermischen Deaktivierung gibt es die chemische Deaktivierung, die durch die im Kraftstoff und Schmierstoff enthaltenen Verunreinigungen wie Schwefel  $S$  und Blei  $Pb$  verursacht wird. Dabei gehen diese Verunreinigungen chemische Verbindungen mit den katalytisch aktiven Substanzen oder dem Washcoat ein. Diese Verbindungen können reversibel (Schwefel) oder irreversibel (Blei) sein. Eine Regeneration des Katalysators kann nur mit hohen Temperaturen ( $\geq 1000^\circ\text{C}$ ) erreicht werden, das wiederum fördert die thermische Alterung [7].

#### 2.2.4 DOC–Diesel Oxidationskatalysator

Aufgrund der dieseltypischen Verbrennung mit Luftüberschuss  $\lambda > 1$  ist die Anwendung eines Drei-Wege-Katalysators nicht zielführend, da die  $NO_x$ -Reduktion nur im Bereich von  $\lambda \leq 1$  ausreichend stattfinden kann. Die generelle Funktionsweise und Aufbau eines DOC entspricht der eines Drei-Wege-Katalysators, lediglich die verwendeten Washcoat- und katalytisch aktiven Substanzen unterscheiden

sich voneinander. Zur Oxidation von  $CO$  und  $HC$  wird daher bei Diesel-PKW ein Diesel-Oxydationskatalysator eingesetzt. Heute hat der DOC an Bedeutung gewonnen, da nicht nur die Oxidation von  $CO$ ,  $HC$  und  $SOF$  (Soluble Organic Fraction, lösliche organische Anteil von Partikel) im Vordergrund steht, sondern auch die Oxidation von  $NO$  zu  $NO_2$ .

Oxidation von  $SOF$  und  $NO$  ( $CO$  und  $HC$  wie bei TWC):



Das  $NO_2/NO_x$ -Verhältnis ist für eine nachgeschaltete Abgasnachbehandlung von signifikanter Bedeutung, denn es beeinflusst die aktive Regeneration des DPFs, das Einspeicherverhalten des LNTs und die  $NO_x$ -Konvertierung des SCRs. Die  $NO_2$ -Bildung an einer oxidierenden Oberfläche ist mit gewissen Einschränkungen verbunden. Generell ist das  $NO/NO_2$ -Verhältnis abhängig von der Temperatur. Dabei liegt bei niedrigen Temperaturen das thermodynamische Gleichgewicht bei  $NO_2$  und bei hohen Temperaturen bei  $NO$ , dass zeigt die rote Linie in Abb. 2-12. Die blau gekennzeichneten Punkte entsprechen den Messungen unter den durchgeführten Randbedingungen. Der limitierende Prozess der  $NO_2$ -Bildung ist für niedrige Temperaturen die Reaktionskinetik.

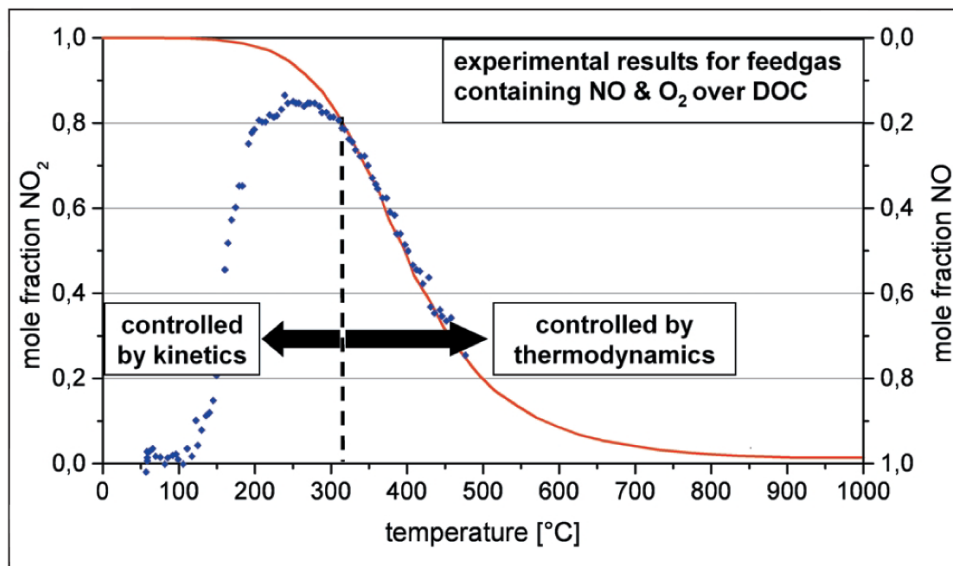
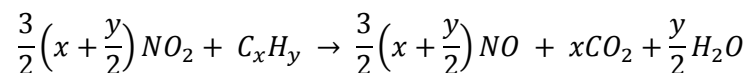
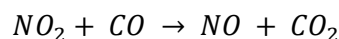


Abb. 2-12;  $NO_2$ -Anteil eines Pt-DOC mit zugeführten Gas von 270ppm  $NO$ , 6%  $O_2$  und 10%  $N_2$  [21]

Zusätzlich gibt es einen weiteren, überlagerten Effekt der die  $NO_2$ -Bildung limitiert. Wie in Abb. 2-13 dargestellt ist, spielt der lighth-off des DOCs eine wichtige Rolle. Bevor nicht ein bestimmter  $CO$ - und  $HC$ -Umsatz erreicht wird, kann auch kein  $NO_2$  gebildet werden. Das vorhandene  $NO_2$  dient bis zum Erreichen dieser Bedingungen als Oxidationsmittel für  $CO$  und  $HC$ .

Reduktion von  $NO_2$  durch  $CO$  und  $HC$ :





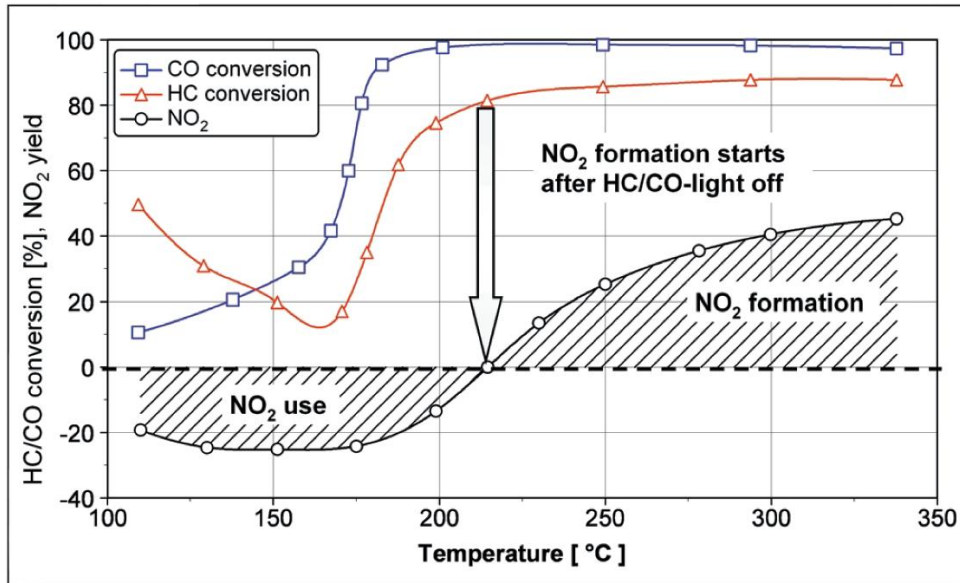


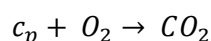
Abb. 2-13; NO<sub>2</sub>-Reduzierung/-Bildung während light-off [21]

Neben den bisher genannten Deaktivierungsmechanismen kommt beim DOC ein weiterer hinzu. Aufgrund der dieseltypischen Verbrennung (Bildung von Rußpartikel) lagern sich bei niedrigen Abgastemperaturen Partikel in den Poren des Washcoats ab und reduzieren damit die katalytisch aktiven Zentren. Dieser Prozess ist reversibel und kann durch höhere Abgastemperaturen rückgängig gemacht werden.

### 2.2.5 Diesel-Partikelfilter

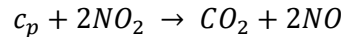
Der Diesel-Partikelfilter ermöglicht eine beinahe vollständige Abscheidung, der bei der Verbrennung entstehenden, Partikel. Heute werden fast ausschließlich keramische Filter für PKW-Anwendungen eingesetzt. Der wesentliche Nachteil ergibt sich durch die notwendige Regeneration des Filters, da mit zunehmender Ruß-Beladung der Gegendruck steigt. Die Partikel werden durch den Diffusionsprozess durch die poröse Wand (Tiefenfiltrierung) oder an der aufgebauten Rußschicht der Kanalwand (Oberflächenfiltrierung) abgeschieden. Damit wird klar, dass mit zunehmender Beladung auch das Abscheidevermögen steigt. Eine passive Regeneration des DPFs mit dem Restsauerstoff im Abgas findet nur bei höheren Temperaturen ( $> 550^{\circ}\text{C}$ ) statt. Um eine Senkung der notwendigen Aktivierungsenergie erreichen zu können, kann eine katalytische Beschichtung auf den DPF aufgetragen werden. Andere Möglichkeiten ergeben sich durch den Einsatz spezieller Additive (metallorganischer Substanzen) im Kraftstoff, Kraftstoffbrenner oder elektrischer Heizelemente [6]. Die heute eingesetzte Regeneration in PKW-Anwendungen entspricht grundlegend der Funktion eines Kraftstoffbrenners. Es wird durch eine spät eingesetzte Nacheinspritzung, die im Brennraum nicht mehr umgesetzt wird, eine ausreichend hohe Exothermie durch den HC- und CO-Umsatz über den DOC erzeugt, die damit verbundene Temperaturerhöhung leitet den Rußabbrand ein. Dieser Regenerationszyklus wird dann durchgeführt, wenn ein definierter Druckverlust über den Filter erreicht wird. Neben der späten Nacheinspritzung werden auch andere Maßnahmen zur Temperaturerhöhung getroffen, z.B. Drosseln der Ansaugluft und damit das Absenken der Frischluftmasse.

Ruß-Oxidation mit O<sub>2</sub>:



Es besteht die Möglichkeit einer kontinuierlichen Regeneration des DPFs, die wesentlich geringere Abgastemperaturen fordert. Die Voraussetzung dafür ist ein optimales Verhältnis von Ruß  $c_p$  und Stickstoffdioxid  $NO_2$ . Der Regenerationsprozess mit  $NO_2$  wird auch als CRT-Effekt (Continuous-Regenerating-Trap) bezeichnet. Die Konvertierungsrate ist stark vom Schwefelgehalt abhängig, bei hohen Schwefelkonzentrationen (1500ppm) kann diese sogar negative Werte annehmen [6].

Ruß-Oxidation mit  $NO_2$ :



Außerdem soll erwähnt werden, dass es auch Partikelkatalysatoren (PM-Kat, Particulate Matter Katalysator) gibt. Aufgebaut ist ein PM-Kat aus einer Wabenstruktur mit offenen Kanälen, sobald die Speicherfähigkeit erschöpft ist, findet keine Filtration mehr statt.

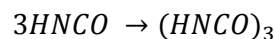
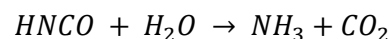
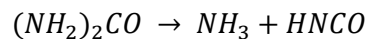
### 2.2.6 SCR-Katalysator

Für zukünftige Emissionsgesetzgebungen ist zusätzlich eine Senkung der Stickoxid-Emissionen erforderlich. Im Nutzfahrzeug-Sektor werden bereits heute SCR-Systeme eingesetzt, dahingegen im PKW-Bereich nur sehr vereinzelt. Bei SCR-Systemen werden selektive Katalysatoren (Vanadium-Pentoxide  $V_2O_5$ , Kupfer  $Cu$  oder Eisen  $Fe$ ) unter Verwendung des Reduktionsmittels Ammoniak  $NH_3$  eingesetzt [9]. Das Reduktionsmittel  $NH_3$  entsteht aus einer ungiftigen Harnstoff-Wasser-Lösung, auch AdBlue genannt. Das AdBlue wird über eine Niederdruckdüse stromaufwärts des SCR-Katalysators eingespritzt, wenn ausreichend hohe Temperaturen für Thermolyse und Hydrolyse erreicht wird. Die eingespritzte AdBlue Menge durch die Dosierung lässt sich über  $\alpha$  (Verhältnis Harnstoff-Mengenstrom zu  $NO_x$ -Mengenstrom) beschreiben.

$$\alpha = \frac{\dot{n}_{NH_3}}{\dot{n}_{NO_x}} = \frac{2 \dot{n}_{Harnstoff}}{\dot{n}_{NO_x}} \left[ \frac{mol_{NH_3}}{mol_{NO_x}} \right]$$

Durch die Thermolyse wird der Harnstoff  $(NH_2)_2CO$  in Ammoniak und Isocyanensäure  $HNCO$  aufgespalten. Die Isocyanensäure reagiert mit Wasser weiter zu Ammoniak und Kohlendioxid (Hydrolyse). Zusätzlich kann eine weitere Reaktion ablaufen, die sehr komplexe Moleküle bildet ( $(HNCO)_3$  Harnstein) [4][20].

Umwandlung vom Harnstoff  $(NH_2)_2CO$  zu Ammoniak  $NH_3$ :



Damit das SCR-System effektiv arbeiten kann, muss bei SCR-Kat-Eintritt die gute  $NH_3$ -Gleichverteilung über den Querschnitt vorliegen. Der  $NO_x$ -Umsatz (Abb. 2-14) in der SCR-Stufe ist generell von folgenden Parametern abhängig:

- $T_{SCR}$ , Temperatur des Katalysators
- $c_{NO_x}$ , vorliegende  $NO_x$ -Konzentration
- $\frac{c_{NO_2}}{c_{NO}}$ ,  $NO_2$  zu  $NO$ -Verhältnis
- $\theta_{NH_3}$ ,  $NH_3$ -Bedeckung (Eingespeicherte  $NH_3$ -Menge  $\theta_{NH_3}$ , = f(Temperatur))
- $m_{exh}$ , Abgasmassenstrom

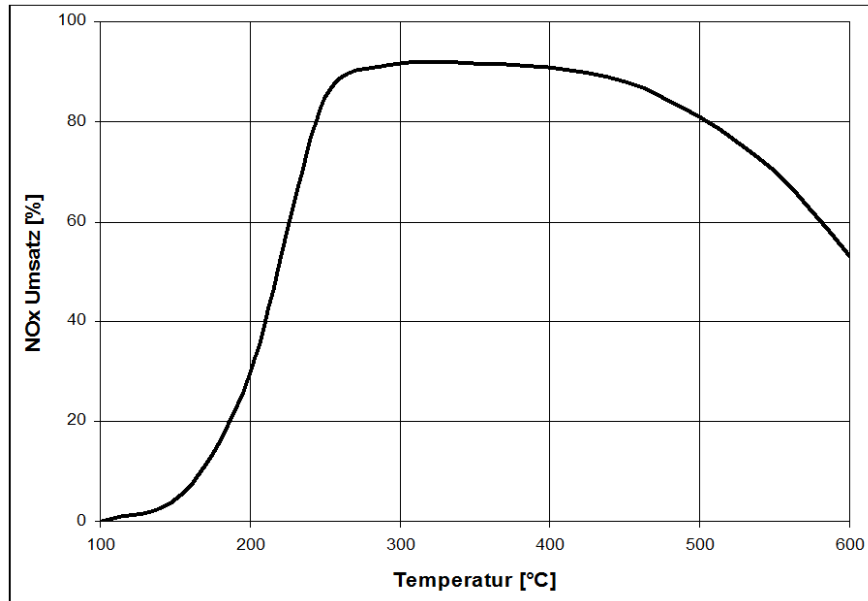
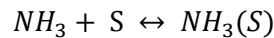


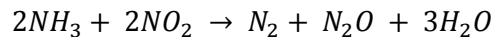
Abb. 2-14;  $NO_x$ -Umsatz in Abhängigkeit der Temperatur für einen SCR-Katalysator [20]

Die Temperatur spielt für den Umsatz eine bedeutende Rolle. Bei niedrigen Temperaturen bildet sich Harnstein, im mittleren Temperaturbereich kommt es zu Lachgasbildung und bei hohen Temperaturen kommt es zu Ammoniakoxidation [19]

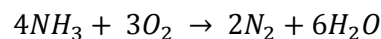
Speicherung von  $NH_3$ :



Lachgas  $N_2O$ -Bildung aus  $NH_3$ :

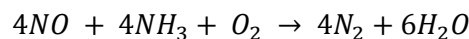


$NH_3$ -Oxidation:

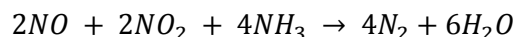


SCR-Katalysatoren bewirken eine  $NO$ -Oxidation, das dadurch gebildete  $NO_2$  verbessert generell die  $NO_x$ -Konvertierung, da bei größerem  $NO_2$ - zu  $NO$ -Verhältnis der Umsatz steigt. Das eingespeicherte  $NH_3$  reagiert an der Katalysatoroberfläche mit den  $NO_x$ , folgende Reaktionen können stattfinden [13]:

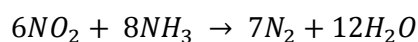
$NO$ -Reduktion mit Standard-SCR:



$NO_x$ -Reduktion mit Fast-SCR:



$NO_2$ -Reduktion mit Slow-SCR:



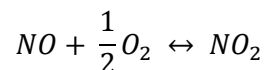
Es kann vorkommen, dass ein bestimmter Anteil des Ammoniaks nicht mehr vom Katalysator adsorbiert werden kann, dadurch kommt es zu einem  $NH_3$ -Durchbruch. Aufgrund der toxischen Wirkung des Ammoniaks ist eine nachgeschaltete Umwandlung durch einen mit Platin beschichteten Katalysator notwendig, der das überschüssige  $NH_3$  zu  $N_2$  und  $H_2O$  umwandelt (Slip-CAT).

### 2.2.7 $NO_x$ -Speicherkatalysator

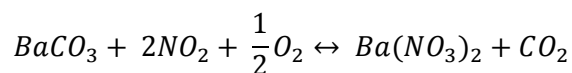
Der  $NO_x$ -Speicherkatalysator entspricht in seiner Grundform einem Drei-Wege-Katalysator. Er besitzt zusätzlich noch eine Speicherkomponente aus Alkali- bzw. Erdalkalimetallen. Diese Metalle besitzen die Fähigkeit  $NO_2$  zu adsorbieren, wenn ein Luftüberschuss im Abgas vorhanden ist. Nach einer bestimmten Zeit muss dieser Speicher durch kurze fette Betriebsphasen regeneriert werden [20].

#### Beschreibung der ablaufenden Schritte:

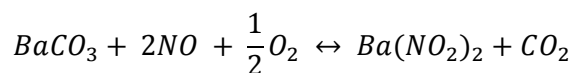
Der Motor wird mit Sauerstoffüberschuss ( $\lambda > 1$ ) betrieben, dadurch wird das, im Abgas befindliche  $NO$ , an der katalytischen Schicht zu  $NO_2$  oxidiert.



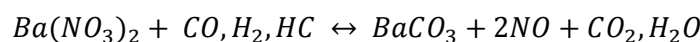
$BaCO_3$  (Speicherkomponente) speichert das vorhandene  $NO_2$  als Barium-Nitrat,



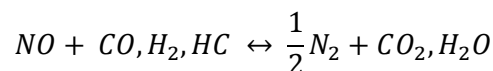
oder das vorhandene  $NO$  als Barium-Nitrit.



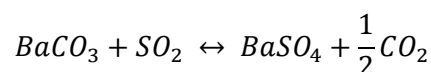
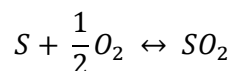
Um die Speicherplätze wieder frei zu bekommen, wird im regelmäßigen Intervall der Motor im Luftmangelbereich ( $\lambda < 1$ ) betrieben:



Die damit freigesetzten Stickoxide werden mit  $CO$ ,  $H_2$  und  $HC$  (durch Fett-Betrieb) zu  $N_2$  reduziert:



Wenn Schwefel  $S$  im Abgas vorhanden ist, werden die  $NO_x$ -Speicherplätze belegt und somit die Speicherfähigkeit reduziert.



Um die mit Schwefel belegten Speicherplätze wieder frei zu bekommen, ist wie bei den  $NO_x$  eine fette Verbrennung notwendig, jedoch ist dafür ein viel höheres Temperaturniveau notwendig ( $> 650^\circ C$ ). Dermaßen hohe Abgastemperaturen bewirken eine thermische Alterung des Katalysators, da die Speicherkomponenten stabile Verbindungen mit Bestandteile des Washcoats und anderen Aktivkomponenten eingehen.

## 2.3 Kinetik

Die Kinetik befasst sich mit der Beschreibung von zeitlich ablaufenden Vorgängen wie chemischen Reaktionen oder physikalisch-chemische Prozesse (Diffusion, Chemisorption). Dafür sind einige Grundbegriffe der Thermodynamik erforderlich, auf die im Folgenden eingegangen wird [11][12][20].

### 2.3.1 Entropie, freie Enthalpie, freie Energie, Affinität und chemisches Gleichgewicht

Die Bruttoreaktion gibt keinerlei Auskünfte darüber in welche Richtung und in welchem Ausmaß eine chemische Reaktion ablaufen wird. Dafür ist die Betrachtung der thermodynamischen Zustandsgröße Entropie des Systems notwendig. Die molare Standardreaktionsentropie  $\Delta_R S_m^o$  kann wie folgt berechnet werden [12]:

$$\Delta_R S_m^o = \sum_{i=1}^n \nu_i S_{mi}^o$$

Die Kennzeichnung der Größen mit dem Symbol  $^o$  bedeutet, dass jene Größen auf Standardbedingungen bezogen werden. Diese Bedingungen sind folgendermaßen definiert:

- $T^o$  wird oft 298K gewählt, Temperaturen vor und nach der Reaktion werden gleich gesetzt.
- $p^o$  wird 1atm = 1,01325bar
- rein getrennte Phase, für beteiligte Stoffe vor und nach der Reaktion
- idealer Gaszustand für einzelne Stoffe wird angenommen

Der Molanteil  $\nu_i$  ist allgemein wie folgt definiert:

$$\nu_i = \frac{n_i}{n_{pro}} \quad \frac{[x \text{ Mol vom Stoff } i]}{[\text{Summe Mol von Produkten}]}$$

$n_i$  entspricht der Molzahl der Komponente  $i$  und  $n_{pro}$  entspricht der gesamten Molzahl der Produkte. Die Umrechnung von Standardbedingungen auf Reaktionsbedingungen erfolgt für die molare Reaktionsentropie  $\Delta_R S_m(T)$  mit:

$$\Delta_R S_m(T) = \Delta_R S_m^o + \int_{T^o}^T \frac{\sum_{i=1}^n \nu_i C_{mpi}^o}{T} dT$$

Nach dem dritten Hauptsatz der Thermodynamik kann für die Entropie idealer kristalliner Stoffe, bei absolutem Nullpunkt, der Wert Null gesetzt werden.

$$\lim_{T \rightarrow 0K} \Delta S = 0$$

Es können nun weitere thermodynamische Zustandsgrößen aus Enthalpie und Entropie definiert werden:

$G = H - TS$ , die freie Enthalpie  $G$  unterscheidet sich von der Enthalpie  $H$  durch die im System gebundene Energie  $TS$ .

$F = U - TS$ , die freie Energie  $F$  beschreibt jenen Anteil der inneren Energie, der durch einen isothermen, irreversiblen Prozess in jeder beliebigen Energieform dem System entzogen werden kann.  $TS$  bezeichnet man als gebundene Energie.

$A^o = -\Delta_R G_m^o = T \Delta_R S_m^o$  ( $H^o = 0$ ), die chemische Affinität  $A^o$  entspricht der treibenden Kraft einer chemischen Reaktion.

- $A^o < 0$ , Reaktionsablauf unmöglich
- $A^o = 0$ , System im Gleichgewicht
- $A^o > 0$ , Reaktionsablauf, nach Überwindung der Aktivierungsenergie, selbstständig chemisches Gleichgewicht.

### 2.3.1.1 Chemisches Gleichgewicht

Der chemische Gleichgewichtszustand ist dann erreicht, wenn die freie Enthalpie ein Minimum erreicht. Für ideale Gase können die Gleichgewichtsbedingung nach folgender Formulierung, für die Verbrennung von Kohlenwasserstoffverbindungen, angegeben werden.

- Allgemein:  $\sum dS = \sum dG = 0$

$$dG_{T,p,n_i} = \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{p,n_i} dT + \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_{T,n_i} dp + \sum \left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,p,n_{j \neq i}} dn_i = 0$$

- Unter der Voraussetzung einer isobare-isothermen Reaktion ergibt sich für ein Mischgas:

$$dG_{T,p,n_i} = \sum \left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,p,n_{j \neq i}} dn_i = 0$$

- Der Ausdruck  $\left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)$  wird auch als chemisches Potential  $\mu_i$  bezeichnet und damit:

$$dG_{T,p,n_i} = \sum \mu_i dn_i = 0$$

- Durch Einsetzen der allgemeinen Gasgleichung ( $p_n V_m = v_n R_m T$ ) und anschließender Integration ergibt sich:

$$\Delta_R H_m^0 - T \Delta_R S_m = \Delta_R G_m^0 + R_m T \sum v_{st,i} \ln \left(\frac{p_i}{p^0}\right) = 0$$

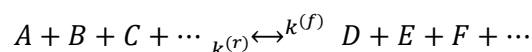
Mit den Gleichgewichtsbedingungen lässt sich für die Gleichgewichtskonstante  $K_p = \prod \left(\frac{p_i}{p^0}\right)^{v_{st,i}}$  folgender Ausdruck ableiten:

$$K_p = e^{-\frac{\Delta_R G_m^0}{R_m T}}$$

Das chemische Gleichgewicht ist dadurch gekennzeichnet, dass Hin- und Rückreaktionen gleich schnell ablaufen. Unter Berücksichtigung, dass die Gleichgewichtskonstante  $K$  nur endliche Werte annehmen kann, können Reaktionen nie vollständig ablaufen. Der Gleichgewichtszustand ist abhängig von der Konzentration der Edukte und der Temperatur. Eine zeitliche Aussage, wann der Gleichgewichtszustand erreicht wird, kann mit dieser Betrachtungsweise nicht getroffen werden.

### 2.3.2 Reaktionskinetik

Mit Hilfe der Reaktionskinetik kann man eine Aussage über die Geschwindigkeit einer Reaktion treffen. Im Vergleich dazu kann die Gleichgewichtsthermodynamik nur Aussagen über den Endzustand einer chemischen Reaktion machen. Die allgemeine Schreibweise des Zeitgesetzes, für eine chemische Reaktion, wird folgenderweise angeschrieben:



Bei dieser chemischen Reaktion entsprechen A, B, C, ... die beteiligten Edukte, D, E, F, ... die beteiligten Produkte und  $k^{(f)}$  den Geschwindigkeitskoeffizienten der Hinreaktion sowie  $k^{(r)}$  den Geschwindigkeitskoeffizienten der Rückreaktion. Durch das Geschwindigkeitsverhältnis der Hin- und Rückreaktion ergeben sich die Konzentrationen.

### 2.3.2.1 Reaktionsgeschwindigkeit

Die Reaktionsgeschwindigkeit  $\dot{r}$  bezeichnet jene Geschwindigkeit, mit der ein beteiligter Stoff in einer Reaktion gebildet oder verbraucht wird. Definiert wird  $\dot{r}$  durch den Umsatz eines Stoffes pro Zeiteinheit und Volumen:

$$\dot{r} = \frac{1}{\nu_j} * \frac{1}{V} * \frac{dn_j}{dt} \left[ \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \text{s}} \right]$$

Läuft eine Reaktion mit konstantem Volumen ab so ergibt sich für die Reaktionsgeschwindigkeit eine vereinfachte Form, da folgendes gilt:  $n_j = V * c_j$ . Damit lässt die  $\dot{r}$  vereinfacht durch die Konzentrationsänderung ausdrücken:

$$\dot{r} = \frac{dc_j}{dt}$$

Theoretisch lassen sich für sehr einfache Reaktionssysteme so die Reaktionsgeschwindigkeiten herleiten. Jedoch ist für Verbrennungsprozesse eine Vielzahl an Reaktionsgleichungen notwendig um das System beschreiben zu können, aufgrund dessen ist eine theoretische Herleitung nicht mehr möglich. Für solche Reaktionen werden empirische Ansätze verwendet, damit die notwendigen Reaktionsgeschwindigkeiten bestimmt werden können. Dafür wird folgender Ansatz verwendet:

$$\frac{dc_j}{dt} = -k * \prod c_i^{a_i}$$

Der Faktor  $k$  und Exponent  $a_i$  sind empirisch zu bestimmen.

### 2.3.2.2 Gleichgewichtsreaktion

Um herauszufinden wie sich die Konzentration von einem der Edukte, z.B. Stoff A während der Reaktion ändert, schreibt man die Reaktionsgeschwindigkeiten der Hinreaktion in folgende Form an:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k^{(f)} * [A]^a [B]^b [C]^c \dots$$

Die zeitliche Änderung der Konzentration des Stoffes A lässt sich durch die Geschwindigkeitskoeffizienten  $k^{(f)}$  und die beteiligten Edukte der Reaktion beschreiben. Kleinbuchstaben a, b, c, ... bezeichnet man als Reaktionsordnungen der beteiligten Stoffe A, B, C, ... Aus der Summe der Reaktionsordnungen kann die Gesamtreaktionsordnung bestimmt werden. Das negative Vorzeichen ist bedingt durch die Konzentrationsabnahme über die Reaktionszeit. Durch die Verwendung der Klammern-Schreibweise [] wird gezeigt, dass diese Größen konzentrationsbeschreibende Charakteristika aufweisen, wie z.B. [A] in mol, kmol/kg oder kmol/m<sup>3</sup>. Es kann auch vorkommen, dass beteiligte Stoffe einer chemischen Reaktion im Überschuss vorkommen. Wenn dies der Fall ist, kann eine vereinfachte Form angeschrieben werden:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k * [A]^a$$

Jene Stoffe, die im Überschuss vorkommen, ändern ihre Konzentration während der Reaktion nur geringfügig. Daher kann man Geschwindigkeitskoeffizienten  $k^{(f)}$  und Stoffe B, C, die ihre Konzentration kaum ändern, zu einem gesammelten Geschwindigkeitskoeffizienten  $k$  zusammenfügen. Den Geschwindigkeitskoeffizienten  $k$  und Reaktionsordnung  $a$  kann man aus einer zeitlichen Messung

der Konzentrationsänderung des Stoffes A bestimmen. Eine Reaktion kann generell in beide Richtungen ablaufen. Die Rückreaktion kann analog zur Hinreaktion angeschrieben werden:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k^{(r)} * [D]^d [E]^e [F]^f \dots$$

Wenn Hin- und Rückreaktion gleich schnell ablaufen, dann ergibt sich das chemische Gleichgewicht der betrachteten Reaktion. Daraus lässt sich folgende Schreibweise ableiten:

$$K_c = \frac{k^{(f)}}{k^{(r)}} = \frac{[D]^d [E]^e [F]^f \dots}{[A]^a [B]^b [C]^c \dots}$$

$$K_c = e^{\frac{-\Delta_R F_m^0}{R_m * T}}$$

Der Gültigkeitsbereich der Formel umfasst nur den Bereich der Elementarreaktionen und nicht den der Bruttoreaktionen die Zwischenreaktionen enthalten.

### 2.3.2.3 Elementarreaktionen

Elementarreaktionen sind jene Reaktionen, die so ablaufen wie es laut Reaktionsgleichung angegeben wird. Grundlegend kann jede Bruttoreaktion in einzelnen Elementarreaktionen aufgeteilt werden.

„Eine Elementarreaktion ist eine Reaktion, die auf molekularer Ebene genauso abläuft, wie es die Reaktionsgleichung beschreibt.“ Homann 1975

Um einen Überblick über den Umfang der Elementarreaktionen zu bekommen werden hier zwei Beispiele angeführt.

- $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$       **aus 37 Elementarreaktionen aufgebaut**
- $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$       **aus über 400 Elementarreaktionen aufgebaut**

Für eine bestimmte Elementarreaktion gibt es immer eine, von den Versuchsbedingungen unabhängige, Reaktionsordnung. Weiters gibt es in der Praxis nur drei Typen von Elementarreaktionen.

**Unimolekulare Reaktionen** mit der **Reaktionsordnung 1**; diese Reaktionen beschreiben denn natürlichen Zerfall oder die Umlagerung von Molekülen; entspricht dem Zeitgesetz 1.Ordnung.

für a=1 gesetzt:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k * [A]$$

umgeformt auf [A] und integriert ergibt

$$\ln \frac{[A_t]}{[A_0]} = -k * (t - t_0)$$

**Bimolekulare Reaktionen** mit der **Reaktionsordnung 2**, diese Reaktionen kommen am häufigsten vor, besitzen Zeitgesetz 2.Ordnung.

für a=2 gesetzt:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k * [A]^2$$



umgeformt auf  $[A]$  und integriert ergibt

$$\frac{1}{[A]_t} - \frac{1}{[A]_0} = k * (t - t_0)$$

**Trimolekulare Reaktionen** mit der **Reaktionsordnung 3**, diese Reaktionen sind vorwiegend Rekombinationsreaktionen, befolgen Zeitgesetz 3.Ordnung.

für  $a=3$  gesetzt:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k * [A]^3$$

umgeformt auf  $[A]$  und integriert ergibt

$$\frac{1}{2} \left( \frac{1}{[A]_t^2} - \frac{1}{[A]_0^2} \right) = k * (t - t_0)$$

#### 2.3.2.4 Temperaturabhängigkeit des Geschwindigkeitskoeffizienten

Der Geschwindigkeitskoeffizienten  $k$  weist eine Temperatur- und Druckabhängigkeit auf, deshalb sind die ablaufenden Verbrennungsvorgänge typischerweise durch die vorherrschende Temperatur geprägt. Eine gute Näherung dieses Verhaltens wird durch den von Arrhenius (1889) aufgestellten Ansatz beschrieben (Arrhenius-Gleichung):

$$k = A * e^{\frac{-E_a'}{R_m * T}}$$

In manchen Fällen ist eine geringe Temperaturabhängigkeit des präexponentiellen Faktors  $A$  erkennbar. Die Abhängigkeit wird durch den Faktor  $T^b$  (Potential-Ansatz) berücksichtigt.

$$k = A' * T^b * e^{\frac{-E_a'}{R_m * T}}$$

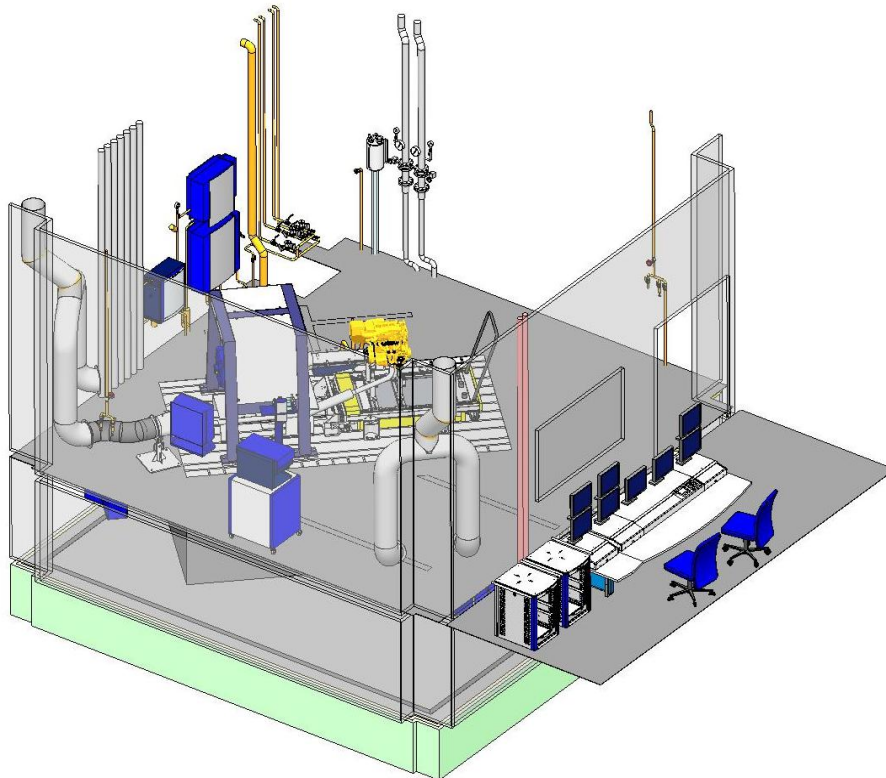
Der präexponentielle Faktor  $A$  bzw.  $A' * T^b$  hat je nach Reaktionstyp eine unterschiedliche Bedeutung:

- Unimolekulare Reaktionen: Präexponentiellem Faktor entspricht dem Kehrwert einer mittleren Lebensdauer des aktiven Elements. ( $A \approx 10^{14} - 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ) [11].
- Bimolekulare Reaktionen: Hier entspricht der Faktor einer Stoßzahl und damit der Stoßanzahl zwischen zwei Molekülen pro Zeit. ( $A \approx 10^{13} - 10^{14} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) [11].
- Trimolekulare Reaktionen: Hier muss während eines bimolekularen Stoß ein dritter Partner den Stoßkomplex treffen. Dieser Stoßpartner muss die dabei freiwerdende Energie aufnehmen (Zahlenwerte für  $A$  können kaum ermittelt werden).

### 3 Prüfstands Aufbau

Dieses Kapitel soll einen kleinen Einblick in den Prüfstands Aufbau, den verwendeten EAS-Komponenten und der Emissionsmesstechnik geben. Mit dem Versuchsträger wurden alle verwendeten Messdaten ermittelt. Basierend auf den angeführten Informationen wurden die entsprechenden Simulationsmodelle parametrisiert und für die Konzeptstudie eingesetzt.

Die Versuche wurden auf einem Motorenprüfstand an der TU Graz durchgeführt, wie er in Abb. 3-1 dargestellt ist. Der generelle Aufbau besteht aus einer Prüfstands-Zelle und einer Beobachtungswarte. In der Prüfstands-Zelle befinden sich der Versuchsträger, Belastungseinheit (Bremse), Messtechnik (Emissionen, Drücke, Temperaturen...) und die Konditioniersysteme (Kühlwasser, Öl, Luft und Kraftstoff) [23]. Über die Beobachtungswarte wird der Prüfstand bedient und alle notwendigen Geräte angesteuert.



**Abb. 3-1;** AVL Standard Motorenprüfstand [5]

#### 3.1 Motor

Der untersuchte Motor ist ein 5-Zylinder-Vollmotor mit Serienreife, der für die Versuche umgebaut wurde. Die Basis des Motors besitzt eine Hochdruck-AGR und eine zweistufige Aufladung. Im Zuge der Umbauarbeiten wurde die Hochdruck-AGR verschlossen und ein Niederdruck-AGR-System aufgebaut. Des Weiteren wurde die zweistufige Aufladung durch eine einstufige ersetzt.

In Tab. 3-1 sind einige Informationen und Kenndaten zum Versuchsmotor angegeben.

<b>Hersteller</b>	Volvo		
<b>Name</b>	I5D		
<b>Type</b>	TCI	Takt:	4
<b>Zylinderanordnung</b>	Reihe		
<b>Leistung</b>	Nenn:	151 [kW]	bei Drehzahl 4000 [1/min]
<b>Drehmoment</b>	Max:	420 [Nm]	Drehzahlbereich 1500-3250 [1/min]
<b>Drehzahl</b>	Min:	550 [1/min]	Max: 4800 [1/min]
<b>Zylinderanzahl</b>	5		
<b>Hubvolumen</b>	2.400 [dm <sup>3</sup> ]		
<b>Hubraummaße</b>	Bohrung	81[mm]	Hub 93.15[mm]
<b>Verdichtung</b>	16.5:1		

Tab. 3-1; Informationen und Kenndaten des Versuchsmotors

### 3.2 Abgasnachbehandlungskomponenten

Am Versuchsträger wurden unterschiedliche Projekte zum Thema Abgasnachbehandlung behandelt. Im Zuge dieser Projekte wurden verschiedene Abgasnachbehandlungskomponenten vermessen und bewertet, darunter waren:

- elektrisch beheizter Katalysator, ECAT
- Diesel-Oxidationskatalysator, DOC
- Diesel-Partikelfilter, DPF
- katalytisch beschichteter Diesel-Partikelfilter, cDPF
- SCR beschichteter Diesel-Partikelfilter, sDPF
- SCR-Katalysator
- NO<sub>x</sub>-Speicherkatalysator, LNT
- Slip-CAT

Aus diesem Umfang wurden fünf EAS-Komponenten (ECAT, DOC, cDPF, sDPF und SCR) für diese Masterarbeit ausgewählt und anhand vorhandener Messungen eine Modellparametrierung durchgeführt. In den nachfolgenden Tabellen (Tab. 3-2, Tab. 3-3, Tab. 3-4, Tab. 3-5 und Tab. 3-6) sind einige grundlegende Informationen über Geometrie, verwendete Materialien und Beschichtung dieser Bauteile angeführt.

ECAT745	Heizelement	Katalysator	Einheit
Durchmesser	3.15	3.15	inch
Länge	0.28	2.93	inch
Zelldichte	160	400	cpsi
Wandstärke	2.56	1.97	mil
Form	kreiszyllindrisch	kreiszyllindrisch	
Trägermaterial	1.4767	1.4767	
Beschichtung	-	3/2/0	Pt/Pd/Rh
elektr. Widerstand	0.055 bei 15°C		Ω

Tab. 3-2; Daten zum ECAT

Beim ECAT handelt es sich um einen elektrisch beheizten Katalysator. Aufgebaut ist dieses Bauteil aus einem Heizelement und einem DOC. Das Trägermaterial ist in beiden Fällen ein aluminiumhaltiger, ferritischer Chromstahl (X8CrAl 20-5, Material Nr. 1.4767 nach DIN 17470). Das ECAT Volumen beträgt ca. 0.37 Liter.

Das Trägermaterial des DOCs ist ein keramischer Werkstoff (Cordierit). Das Katalysatorvolumen entspricht ca. 1.69 Liter bei einer Länge von 4 Zoll.

DOC730	Katalysator	Einheit
Durchmesser	5.66	inch
Länge	4.09	inch
Zelldichte	400	cpsi
Wandstärke	4.3	mil
Form	kreiszyllindrisch	
Trägermaterial	Cordierit	
Beschichtung	3/2/0	Pt/Pd/Rh

**Tab. 3-3;** Daten zum DOC

Der cDPF besitzt wie der DOC ein keramisches Trägermaterial (Siliciumcarbid). Zusätzlich besitzt dieser Dieselpartikelfilter eine katalytische Beschichtung und ein Volumen von ungefähr 3.3 Liter auf einer Länge von 8 Zoll.

cDPF744	Filterelement	Einheit
Durchmesser	5.66	inch
Länge	8	inch
Zelldichte	300	cpsi
Wandstärke	10	mil
Form	kreiszyllindrisch	
Trägermaterial	SiC	
Beschichtung	2/1/0	Pt/Pd/Rh

**Tab. 3-4;** Daten zum cDPF

Der sDPF besitzt einen ähnlichen Trägerwerkstoff wie der cDPF, in diesem Fall ist es ein siliziuminfiltriertes Siliziumcarbid. Der sDPF besitzt eine MMO-Zeolithe (Mixed-Metal-Oxide) Beschichtung und hat ein Volumen von etwa. 3.3 Liter auf einer Länge von 8 Zoll.

sDPF722	Filterelement	Einheit
Durchmesser	5.66	inch
Länge	8	inch
Zelldichte	300	cpsi
Wandstärke	12	mil
Form	kreiszyllindrisch	
Trägermaterial	Si-SiC	
Beschichtung	MMO-Zeolithe	

**Tab. 3-5;** Daten zum sDPF

Das Trägermaterial für den SCR Katalysator ist dasselbe Material wie für den DOC. Der Katalysator besitzt eine Cu-Zeolith Beschichtung und ein Volumen von rund 1.69 Liter auf einer Länge von 4 Zoll.

SCR736	Katalysator	Einheit
Durchmesser	5.66	inch
Länge	4.09	inch
Zelldichte	400	cpsi
Wandstärke	4.3	mil
Form	kreisförmig	
Trägermaterial	Cordierit	
Beschichtung	Cu-Zeolith	

Tab. 3-6; Daten zum SCR

### 3.3 Messtechnik

Die Messtechnik behandelt ausschließlich die eingesetzte Emissionsmesstechnik am Versuchsträger. Verwendet wurden zwei unterschiedliche Emissionsmessgeräte, eine CEB (Combustion-Emission-Bench) und ein FTIR (Fourier-Transform-Infrarot-Spektrometer) beides AVL-Produkte. Die CEB kann nur bestimmte Komponenten des Rohabgases messen, da für gewisse Spezies bestimmte Analysator im Messgerät verbaut sind. Dahingegen ist das FTIR in der Lage eine Vielzahl an unterschiedlichen Komponenten zu detektieren.

#### CEB

In einer CEB befinden sich unterschiedliche Analysatoren, die bestimmte Komponenten des Abgases messen können [2]:

- *CO* und *CO<sub>2</sub>* mit NDIR-Analysator (Nicht-dispersive Infrarot Absorption)
- *THC* (Total Hydro-Carbons) mit FID-Analysator (Flammenionisationsdetektor)
- *NO* und *NO<sub>x</sub>*, mit CLD-Analysator (Chemilumineszenz)
- *O<sub>2</sub>* mit Paramagnetischem-Analysator

#### FTIR

Das Prinzip beruht auf der Fourier-Transformations-Infrarot-Spektroskopie [18]. Mit einem FTIR ist es möglich eine Vielzahl an unterschiedlichen Abgaskomponenten messen zu können [3]:

- *CO*, *CO<sub>2</sub>*, *COS*, *H<sub>2</sub>O*, *SO<sub>2</sub>*, *CH<sub>4</sub>*, *C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>*, *C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>*, *C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>*, *C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>*, *C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>*, *C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>*, *C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>*, *NC<sub>5</sub>*, *NC<sub>8</sub>*, *NO*, *NO<sub>2</sub>*, *N<sub>2</sub>O*, *HNCO*, *HCN*, *CH<sub>3</sub>OH*, *C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH*, *HCHO*, *CH<sub>3</sub>CHO*, *HCOOH*, *CH<sub>3</sub>COOH* mit FTIR-Spektrometer
- *CO<sub>2</sub>* mit NDIR-Analysator (für EGR)
- *THC* (Total Hydro-Carbons) mit FID-Analysator
- *O<sub>2</sub>* mit Paramagnetischem-Analysator

Zusätzlich verfügt das FTIR über eine weitere Funktion, die es ermöglicht während eines Versuches zwischen vier Mess-Positionen mit Hilfe einer Switch Box zu wechseln. Diese Funktionalität ist dann nützlich, wenn nicht ausreichend Messtechnik verfügbar ist um die geforderten Positionen abdecken zu können.

## 4 Parametrierung der Einzelkomponenten

Dieses Kapitel befasst sich mit der Parametrierung und Entwicklung der einzelnen EAS-Simulationsmodelle (MATLAB-Simulink-Modelle). Durch die Randbedingungen, dass die abzustimmenden Modelle in kompilierter Form vorlagen und zusätzlich nur vorhandene Messungen für die Parametrierung von DOC, ECAT, cDPF, sDPF und SCR eingesetzt werden konnten, wurde die Arbeit deutlich beeinflusst. Das bedeutet, dass mit den Modellen nur jene Parameter verändert werden konnten, die für den Benutzer freigeschnitten waren. Wenn ein Modell erweitert werden musste, wurde dies von Seiten der AVL durchgeführt und erst danach konnte das neue Modell wieder eingesetzt werden. Außerdem ist eine korrekte Parametrierung der einzelnen Reaktionen nur anhand bestimmter Messungen möglich, aufgrund dessen ergibt sich bereits eine generelle Herausforderung.

Zu Beginn lag das Hauptaugenmerk auf der Parametrierung der Modelle, jedoch stellte sich im Zuge der Arbeit heraus, dass die vorliegenden Simulationsmodelle Schwachstellen aufwiesen. Daher wurde die Aufgabenstellung um die Steigerung des Reifegrades der einzelnen Modelle erweitert. Aufgrund des gesetzten Zeitlimits von acht Wochen für die gesamten Modell-Parametrierung wurden die Genauigkeitsanforderungen an die EAS-Modelle verringert. Es wurde jedoch Wert darauf gelegt, dass einzelne Trends sowie Größenordnungen eingehalten werden konnten.

Im Grunde wiederholten sich die Abstimmungsarbeiten der einzelnen Modelle, daher wird die detaillierte Vorgehensweise anhand der DOC-Parametrierung gezeigt und für die übrigen Modelle, wie ECAT, cDPF, sDPF und SCR jeweils eine kurze Zusammenfassung angegeben. Im nachfolgenden Kapitel 4.1 wird auf die generelle Vorgehensweise für die Modell-Parametrierung eingegangen.

### 4.1 Vorgehensweise

Wie bereits erwähnt wiederholt sich die Vorgehensweise für die Parametrierung der EAS-Modelle. Je nach Komponente gibt es geringe Abweichungen in der Modellabstimmung, z.B. wurde das SCR-Modell auf Basis von Charakterisierungsmessungen (Kapitel 4.5) abgestimmt und anschließend mit Hilfe eines FTP72 fein abgestimmt. Im Vergleich dazu wurde das DOC-Modell vorwiegend mit der transienten Spur eines FTP72 parametriert.

Stationäre Messdaten, wie z.B. eine Kennfeldvermessung oder Messpunkte aus Charakterisierungsversuche, dienen für die Basisabstimmung der Kinetik-Parameter. Da die EAS-Modelle für die Konzeptuntersuchung (Kapitel 5) ausschließlich auf einen transienten Testzyklus angewendet werden, wurde bei den Abstimmungsarbeiten der Schwerpunkt auf transiente Messdaten gelegt.

Grundlegend wurde folgende Vorgehensweise bei der Modellabstimmung eingehalten:

- Durchsicht und Plausibilisieren der Messdaten
- Erstellung der Inputdaten für die Parametrierung
- Geometrie- und Materialparameter
- Bestimmung der Kinetik-Parameter
- Verifizierung Messung/Rechnung

#### **Durchsicht und Plausibilisieren der Messdaten**

Für die Parametrierung der Modelle waren vorwiegend die Abgaskonzentrationen, -massenstrom und -temperatur von Bedeutung. Diese wurden mit Hilfe einer CEB (Combustion Emission Bench) und eines

FTIRs (Fourier Transform Infrarot Spektrometer) gemessen. Wobei die CEB vorwiegend an der Messposition EO (Engine Out) und das FTIR, je nach Anforderung, an unterschiedliche Messpositionen des EAS-Stranges positioniert war.

Bevor mit der Modellanwendung begonnen werden konnte, war eine Begutachtung der Messdaten notwendig. Es kann vorkommen, dass aufgrund menschlicher oder auch technischer Fehler Messungen unbrauchbar werden. Daher sind Durchsicht und Plausibilisieren der Messdaten notwendig. Im Zuge der Messdatendurchsicht mussten einige Messungen als unbrauchbar eingestuft werden, da entweder Messgeräte ausgefallen waren, ein Defekt während der Messung auftrat oder generell an falscher Position gemessen wurde.

### **Erstellung der Inputdaten für die Parametrierung**

Die brauchbaren Messdaten mussten für die weitere Anwendung aufbereitet und entsprechend strukturiert werden. Je nach Modell sind unterschiedliche Eingangsdaten für die Modellabstimmung notwendig. Dafür wurden die notwendigen Größen aus den Messdaten entnommen und in passender Form abgelegt.

### **Geometrie- und Materialparameter**

Der erste Schritt in der Parametrierung besteht darin, die korrekten Geometrie- und Materialparameter für die EAS-Modelle zu finden. Dafür wurden die notwendigen Geometrieparameter aus der Bauteilbeschreibung übernommen und die entsprechenden Materialparameter (Dichte  $\rho$ , spezifische Wärmekapazität  $c_p$  und Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$ ) waren in einer AVL-Datenbank zu finden.

### **Bestimmung der Kinetik-Parameter**

Die Bestimmung der Kinetik-Parameter der vorkommenden Reaktionen wurde mit Hilfe von stationärer und transients Messdaten durchgeführt. Wie bereits erwähnt wurde sind nur vorhandene Messungen für die Parametrierung eingesetzt worden. Diesbezüglich gab es einen Mangel an Messdaten, bezogen auf die Untersuchung spezieller Charakteristiken einiger EAS-Komponenten, wie z.B. HC - und CO - Speicherfähigkeit des DOCs. Des Weiteren wird der Umfang und die Wechselwirkungen der vorhandenen Kinetik Parameter behandelt.

### **Verifizierung Messung/Rechnung**

Zum Schluss wurde eine Verifizierung zwischen Mess- und Rechenergebnissen durchgeführt und erkennbare Unterschiede und Auffälligkeiten erläutert. Zusätzlich werden Stärken und Schwächen sowie Gültigkeitsbereiche der einzelnen Modelle aufgezeigt. Der dargestellte Modellstand dient im Anschluss für den Einsatz in den Konzeptuntersuchungen.

## **4.2 DOC-Parametrierung**

Neben der Parametrierung nimmt die Modellentwicklung einen wichtigen Teil dieser Arbeit ein. Das Basismodell des DOCs wurde ebenfalls in ECAT und cDPF eingesetzt, somit konnten aus der DOC-Parametrierung gewonnen Erkenntnisse in die ECAT und cDPF Abstimmung einfließen.

In Kapitel 2.2 sind die Reaktionen beschrieben, die in einem DOC ablaufen können. Aus der Anzahl der möglichen Reaktionen ist die Komplexität einer realitätsnahen modellbasierten Abbildung erkennbar. Eine Berücksichtigung aller Reaktionen in einem Simulationsmodell ist in den meisten Fällen nicht zielführend, da der Aufwand für die Parametrierung nicht tragbar ist. Daher muss vorab definiert werden, welche Reaktionen ein Modell überhaupt berücksichtigen soll.

#### 4.2.1 Durchsicht und Plausibilisieren der Messdaten

Für die Parametrierung des DOC-Modells mussten zu Beginn die vorhandenen Messdaten begutachtet werden. Zur Verfügung standen stationäre wie auch transiente Messdaten. Die stationären Messdaten resultierten aus einer Kennfeldvermessung, in dieser Vermessung wurde über den gesamten Motor-Kennfeldbereich, jeweils vor und nach DOC, Messungen durchgeführt. Transiente Messdaten basieren auf unterschiedlichen Lastsprüngen und auf Testzyklen.

Außerdem muss noch erwähnt werden, dass der, für die Parametrierung verwendete, transiente Testzyklus aus zwei unterschiedlichen Messungen dargestellt wurde. Grund dafür ist der verwendete Versuchsaufbau, welcher aus ECAT-DOC-cDPF-SCR bestand und die begrenzte Anzahl der Emissionsmesstechnik. Für die Messungen befand sich die CEB auf der Position EO (vor ECAT) und mit dem FTIR wurde je nach Bedarf die Messposition getauscht. In Tab. 4-1 sind die beiden Messungen laut Messprotokoll gezeigt. Aus File 3604/FTIRL1 wurden die Messgrößen für den Eingangsvektor und aus File 3595/FTIRL1 die Messgrößen für den Ausgangsvektor entnommen. Aus dieser Vorgehensweise ergibt sich generell eine Ungenauigkeit, da die Messgrößen für die Parametrierung aus zwei unterschiedlichen Versuchen stammen. Die Tatsache muss bei der Parametrierung und Verifizierung berücksichtigt werden.

DATUM	PUMA/ATF	Beschreibung/ Test	Kommentar/ Parameter	EAS1 (ECAT)	EAS2 (DOC)	EAS3 (DPF)	EAS4 (DPF)	EAS7 (SCR)	EAS8 (SCR)	CEB1_L1	CEB1_L2	FTIR L1
10/25/2011	3595	FTP 72 kalt	ohne Heizung	745	730	744	-	-	-	eo	-	nDOC
10/28/2011	3604	FTP 72 kalt (ECAT Endstufe defekt)	ohne Heizung	745	730	744	-	-	-	eo	-	nECAT

Tab. 4-1; FTP72, Messungen für DOC

Die stationären Messdaten wurden für die Basisparametrierung des Modells angewandt und mit den transienten Messdaten wurde die Parametrierung abgeschlossen. In Abb. 4-1 sind die transienten Messspuren eines kalten FTP72 gezeigt, hieraus sind gewisse charakteristische Merkmale zu erkennen, die auf bestimmte Reaktionen im DOC zurückzuführen sind. Abgebildet sind Temperatur sowie Emissionsspuren für *NMHC*, *CO*, *NO* und *NO<sub>2</sub>*. Die *NMHC*-Emissionen entsprechen den „Non Methan HC“ auf *C<sub>3</sub>* Basis. Schwarz dargestellt sind die Größen bei DOC-Eintritt (UP, upstream) und blau gekennzeichnet sind die Größen bei DOC-Austritt (DWN, downstream). Zusätzlich sind in dieser Abbildung vier Bereiche markiert und herausgehoben auf die im Folgenden näher eingegangen wird.



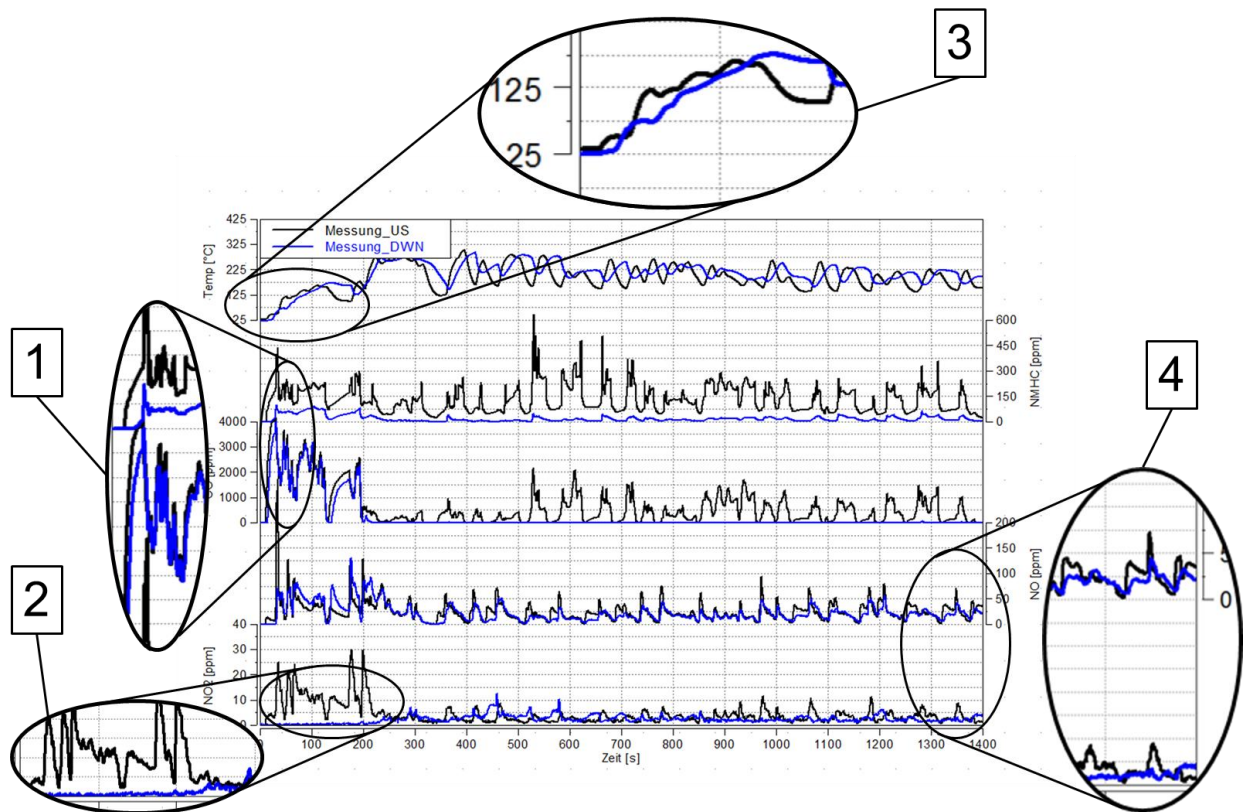


Abb. 4-1; Messung DOC US/DWN Temperatur, NMHC, CO, NO und NO<sub>2</sub>

**Bereich1** zeigt CO- und NMHC-Konzentrationen vor und nach DOC. Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass die Messungen aus zwei unterschiedlichen Versuchen stammen ist eine deutliche NMHC-Speicherung und eine geringe CO-Speicherung erkennbar. Der Einfluss der NMHC-Speicherung ist hier in den ersten 100 Sekunden erkennbar. Während dieser Zeit wird mengenmäßig ungefähr die Hälfte der NMHC-Emissionen an der Oberfläche des DOC eingespeichert und bei höheren Temperaturen wieder umgesetzt. Aufgrund des eingespeicherten Anteils steht der Umsetzung, neben der Eingangskonzentration, eine höhere Menge an NMHC zur Verfügung, wodurch es zu einer höheren Exothermie kommt. Eine genaue Parametrierung der NMHC-Speicherung ist nur mit Hilfe eigener Speicherversuche möglich. Da keine dieser Messungen für den DOC zur Verfügung standen, wurde die Abstimmung anhand des vorhandenen kalten FTP72 durchgeführt. Aufgrund der geringen CO-Speicherung im Vergleich zur NMHC-Speicherung, kann auf diese in der Modell-Anwendung verzichtet werden.

**Bereich2** zeigt die NO<sub>2</sub>-Spur der ersten 200 Sekunden des kalten FTP72. Sehr gut zu erkennen ist, dass der DOC während dieser Zeit das gesamte NO<sub>2</sub> reduziert und/oder einspeichert. Bekannt ist, dass durch vorhandenes Wasser in flüssiger Phase NO<sub>2</sub> gespeichert werden kann [8]. Betrachtet man in **Bereich3** die Temperaturspuren so ist erkennbar, dass die Temperatur stromabwärts ein kleines Plateau bei ca. 75°C aufweist. Dieses Plateau entsteht durch das, an der Oberfläche des DOC, kondensierende Wasser im Abgas. Durch das Erreichen höherer Temperatur verdampft das zuvor kondensierte Wasser, damit lässt sich der Bereich2 der NO<sub>2</sub>-Konzentration erklären. Ab einer Temperatur von ca. 120°C wird bereits CO und NMHC durch den DOC umgesetzt. Neben Sauerstoff kann CO und NMHC auch mit NO<sub>2</sub> reduziert werden. Wenn der DOC zu klein dimensioniert ist, kann nicht das gesamte NMHC und CO oxidiert werden und dadurch wird kein oder nur wenig NO<sub>2</sub> gebildet, dies wird im **Bereich4** dargestellt. Da aufgrund des verwendeten DOCs nur geringfügig NO<sub>2</sub> gebildet und vorwiegend NO<sub>2</sub>

reduziert wird, muss die  $NO_2$ -Reduzierung durch  $CO$  und  $HC$  im Simulationsmodell berücksichtigt werden.

Zusammengefasst kann gesagt werden, dass neben den Standard-Reaktionen wie  $CO$ -,  $NMHC$ - und  $NO$ -Oxidation auch eine  $NMHC$ -Speicherung sowie  $NO_2$ -Reduktion im DOC-Modell berücksichtigt werden muss.

#### 4.2.2 Erstellung der Inputdaten für die Parametrierung

Für die Anwendung des DOC-Modells mussten die Messdaten entsprechend vorbereitet werden, indem eine Aufbereitung der erforderlichen Messgrößen gemacht wurden. Es musste die Temperaturspur des Thermoelements auf die tatsächliche Gastemperatur, unter Verwendung eines inversen Thermoelements, umgerechnet werden. Dieses mathematische Modell ist in der Lage, auf Basis bestimmter Informationen, die Gastemperatur aus der Sensortemperatur zu ermitteln. Dafür waren notwendig, die Geometrie- und Material-Eigenschaften des Thermoelements sowie die ungefähre Gehäusetemperatur, in dem sich das Thermoelement befand.

Neben der Abgastemperatur musste auch der Abgasmassenstrom für den DOC aus den Messdaten errechnet werden. Aufgrund des Niederdruck-EGR-Systems setzt sich der gesuchte Massendurchsatz aus TP-Abgasmassenstrom  $m_{f_{EXH}}$  und EGR-Massenstrom  $m_{f_{EGR}}$  zusammen. Zusätzlich mussten die notwendigen Abgaskomponenten aufbereitet werden. Das DOC-Modell benötigt  $O_2$ -,  $NO_2$ -,  $CO_2$ -,  $CO$ -,  $NO$ -,  $NMHC$ - und  $NH_3$ - Konzentrationen in der Einheit ppm, welche in der Modellanwendung unter dem Eingangsvektor „ $x_{ppmUS}$ “ zusammengefasst werden. Aufgrund der unterschiedlichen Messreihen und verwendeten Messgeräte mussten diese Emissionsspuren geschiftet werden.

Die aufbereiteten Messdaten für den DOC wurden in einem Textfile abgelegt und für die Anwendung im Modell in Matlab eingelesen.

#### 4.2.3 Geometrie- und Materialparameter

Zu Beginn wurden die Geometrieparameter für den DOC730 direkt in das Simulationsmodell eingetragen (Eingabefeld laut Tab. 4-2). Eine mögliche Anpassung der Stoffwerte war erforderlich, da neben Cordierit auch Metallträger verwendet wurden. Zusätzlich zu den Geometrie- und Materialparameter war es notwendig zwei weitere Parameter anzugeben; erstens eine Starttemperatur des DOC-Substrates und zweitens die Umgebungstemperatur.

Parameter, DOC	Einheit
Volumen	l
Substrat Durchmesser	m
Zelldichte	1/inch <sup>2</sup>
Wandstärke des Substrates	mil
Wärmedurchgangskoeffizient an Umgebung	W/m <sup>2</sup> K
Initialisierungstemperatur	K
Umgebungstemperatur	K

Tab. 4-2; Eingabefeld der Geometrieparameter für das DOC-Modell

In Tab. 4-3 sind die verwendeten Materialparameter für das DOC-Modell dargestellt. Die Stoffwerte werden im Modell nicht konstant, sondern als Funktion der Temperatur berücksichtigt. Dafür wurden die korrekten Materialparameter aus einer Materialdatenbank (AVL) für das Modell übernommen.

Materialparameter, DOC	Einheit
Temperatur	K
Wärmeleitfähigkeit	W/mK
Dichte	kg/m
Spezifische Wärmekapazität	W/m <sup>2</sup> K

Tab. 4-3; Materialparameter für das DOC-Modell

#### 4.2.4 Bestimmung der Kinetik-Parameter

Die Bestimmung der Kinetik-Parameter war dadurch gekennzeichnet, dass passende K/E-Paarungen für die einzeln vorkommenden Reaktionen gefunden werden mussten (Kapitel 2.3.2, K entspricht dem präexponentiellen Faktor  $A$  und E der Aktivierungsenergie  $E'_a$ ). Die Ausgangsbasis des DOC-Modells berücksichtigte die  $CO$ -,  $NMHC$ - und  $NO$ -Oxidation, die dafür notwendigen Parameter sind in Tab. 4-4 angeführt. Wie man gut erkennen kann, umfassen bereits diese drei Reaktionen einen Umfang von rund 22 Parameter [1]. Auf Basis dieses Stands wurde mit der Parametrierung des DOC-Modells begonnen.

Kinetik-Parameter, DOC	Einheit
R01_E1, HC-Oxidation	K
R01_K1, HC-Oxidation	Kmol/m <sup>2</sup> s
R01_E2, CO-Inhibierungs-Parameter	K
R01_K2, CO-Inhibierungs-Parameter	-
R01_E3, HC-Inhibierungs-Parameter	K
R01_K3, HC-Inhibierungs-Parameter	-
R01_E4, CO/HC-Inhibierungs-Parameter	K
R01_K4, CO/HC-Inhibierungs-Parameter	-
R01_E5, NO-Inhibierungs-Parameter	K
R01_K5, NO-Inhibierungs-Parameter	-
R02_E1, CO-Oxidation	K
R02_K1, CO-Oxidation	Kmol/m <sup>2</sup> s
R02_E2, CO-Inhibierungs-Parameter	K
R02_K2, CO-Inhibierungs-Parameter	-
R02_E3, HC-Inhibierungs-Parameter	K
R02_K3, HC-Inhibierungs-Parameter	-
R02_E4, CO/HC-Inhibierungs-Parameter	K
R02_K4, CO/HC-Inhibierungs-Parameter	-
R02_E5, NO-Inhibierungs-Parameter	K
R02_K5, NO-Inhibierungs-Parameter	-
R03_E, NO/NO <sub>2</sub> -Kinetik-Parameter	K
R03_K, NO/NO <sub>2</sub> -Kinetik-Parameter	m <sup>2.5</sup> /kmol <sup>0.5</sup> s

Tab. 4-4; DOC-Kinetik-Parameter für Basis-Simulationsmodell

Mit diesem Modell wurde zu Beginn eine Variation des Wärmedurchgangskoeffizienten durchgeführt um den Einfluss dieses Parameters abschätzen zu können. Da bei dieser Parametervariation keine sichtbaren Unterschiede erkennbar waren, wurde dafür ein eigener Testfall aufgestellt, damit das Problem besser lokalisiert werden konnte. In diesem Testfall wurde das DOC-Modell mit einem definierten Massendurchsatz und einer Gastemperatur gerechnet. Für diese Untersuchung wurde die Reaktionskinetik deaktiviert damit nur der Wärmeverlust gezeigt werden konnte. Zudem wurde der Wärmedurchgangskoeffizienten über einen weiten Bereich variiert um eine entsprechend veränderte Gasaustrittstemperatur erwarten zu können, in Abb. 4-2 ist dieser Testfall dargestellt. Der DOC wird im kalten Zustand mit einer Abgastemperatur von 200°C und einem Abgasmassenstrom von 0.03kg/s beaufschlagt. Im Versuch wurde der Wärmedurchgangskoeffizienten in den Grenzen von 0.1 bis 50W/m<sup>2</sup>K verändert. Zu erkennen ist, dass sich die Gastemperaturen am Austritt lediglich um 0.009°C unterscheiden.

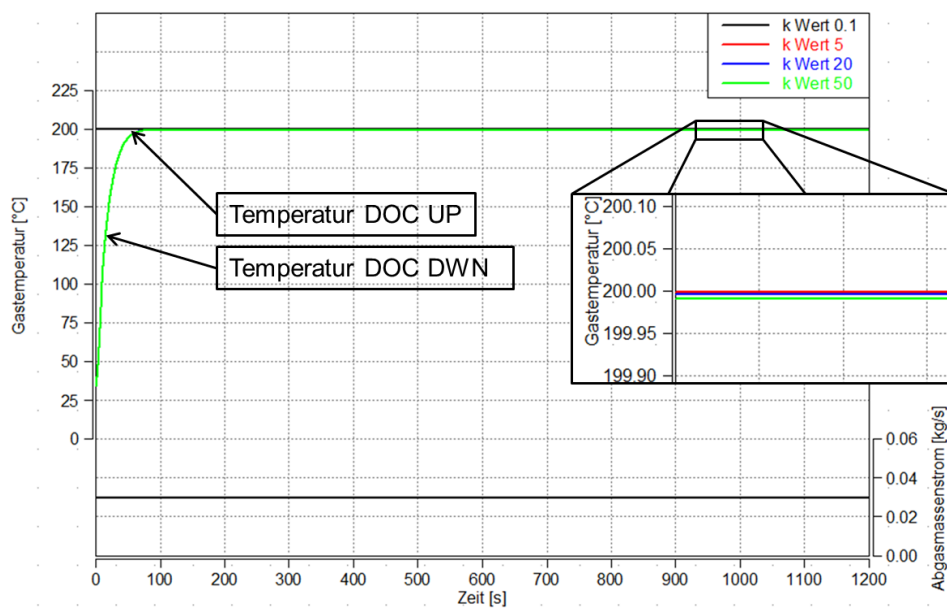


Abb. 4-2; Testfall Variation des Wärmedurchgangskoeffizienten

Auf Basis dieser Untersuchung wurde ein Fehler im Wärmeübergangsmodell des Programmcodes gefunden. Trotz dieses Fehlers wurde mit der Parametrierung der Reaktionen begonnen. Vorerst wurden nur *CO*- und *NMHC*-Oxidation berücksichtigt, da aufgrund der fehlenden *NO*<sub>2</sub>-Reduktion im DOC-Modell die *NO*-Oxidation nicht abgestimmt werden kann.

### ***CO*- und *NMHC*-Oxidation**

Die Herausforderung bei der Parametrierung liegt darin, dass sich die Reaktionen untereinander beeinflussen, daher wurde zu Beginn die *CO*-Oxidation deaktiviert und lediglich der *NMHC*-Umsatz betrachtet. Durch die Deaktivierung der *CO*-Oxidation wird jedoch auch das Temperaturniveau der Exothermen geringer. Für eine erste Abstimmung der Reaktions-Parameter ist diese Vorgehensweise ausreichend. Vorab muss noch ein Punkt erläutert werden; die Reaktionen im Modell berücksichtigen nicht die gemessenen *HC*-Konzentrationen sondern beziehen sich dabei auf *NMHC*-Konzentrationen mit C<sub>3</sub>-Basis. Dabei wird von den gemessenen, unverbrannte Kohlenwasserstoffen die Methan-Konzentration abgezogen und auf C<sub>3</sub>-Basis umgerechnet.

$$NMHC = \frac{(HC - CH_4)}{3}$$

Um einen Einblick in die verwendeten Formeln der *NMHC*-Oxidation zu bekommen, sind die dafür notwendigen Gleichungen angeführt.

$$\dot{r}_{NMHC} = \frac{K_1 * y_{NMHC}^L * y_{O_2}^L}{D}$$

$$D = T_{solid} * (1 + K_2 * y_{CO}^L + K_3 * y_{NMHC}^L)^2 * (1 + K_4 * (y_{CO}^L)^2 * (y_{NMHC}^L)^2) * (1 + K_5 * (y_{NO}^L)^{0.7})$$

$$K_i = k_i^0 * e^{\left(\frac{-T_{A,i}}{T_{solid}}\right)}$$

Die Reaktionsgeschwindigkeit  $\dot{r}_{NMHC}$  ist abhängig von der Geschwindigkeitskonstanten  $K_1$ , Molanteilen von *NMHC* und *O<sub>2</sub>* an der reaktiven Oberfläche in der Gasphase und einem Inhibierungsterm  $D$ . Dieser Inhibierungsterm beschreibt empirisch die Hemmung der Reaktion. Die Größe  $T_{A,i}$  entspricht der Arrhenius Aktivierungsenergie, ergibt sich aus  $T_A = E/R_m$ .

Die Abstimmung der *NMHC*-Oxidation erfordert eine experimentelle Vorgehensweise, wie auch bei den anderen Reaktionen. Es wurden verschiedene K/E-Paarungen (E entspricht dem Parameter  $T_{A,i}$ ) gerechnet und die Ergebnisse miteinander verglichen. In den Bereichen in denen Temperatur und *NMHC*-Umsetzung gut übereinstimmten, wurde die Parameterpaarung markiert. Im nächsten Schritt wurde aus zwei guten Parameterpaarungen eine neue K/E Paarung erstellt. Dabei wurde der Temperaturbereich ab 150°C für die Abstimmung der Reaktionen betrachtet, da unter diesem Temperaturbereich die *NMHC*-Speicherung wirksam ist. Nachdem die *NMHC*-Umsetzung einigermaßen gut abgestimmt war, wurden die vier Inhibierungsterme für diese Reaktion angepasst. Diese Inhibierungsterme können die *NMHC*-Konvertierung verbessern oder verschlechtern.

Nach vorläufigem Abschluss der *NMHC*-Parametrierung wurde mit der *CO*-Oxidation fortgefahren, welche unter Berücksichtigung der *NMHC*-Oxidation parametrierung wurde. Diese Vorgehensweise entspricht derselben wie bei der *NMHC*-Umsetzung. Nachdem die *CO*-Reaktion parametrierung war, mussten beide Reaktionen, sowohl *NMHC*- als auch *CO*-Oxidation, gemeinsam fein abgestimmt werden. Zusammengefasst können folgende Schritte angeführt werden:

- Abstimmung der *NMHC*-Oxidation, mit deaktivierter *CO*-Oxidation
- Abstimmung der *CO*-Oxidation, mit aktivierter *NMHC*-Oxidation
- Feinabstimmung *NMHC*-Oxidation und *CO*-Oxidation

In Abb. 4-3 erkennt man, dass besonders die Kaltstartphase des FTP72 von Bedeutung ist. Grund dafür ist eine *NMHC*-Speicherfähigkeit des DOCs, die in dem aktuell dargestellten Modell noch nicht berücksichtigt werden konnte. Ab Sekunde 200 kann die Rechnung der Messung ungefähr folgen. Phasenweise zeigt die Rechnung Konvertierungsraten von 100 Prozent. Diese Charakteristik des Modells ist durch fehlende Transportlimitierung der Grenzschicht zu den aktiven Zentren der Oberfläche bedingt. Eine Erweiterung des Modells um diese Funktion war in der Arbeit nicht vorgesehen.

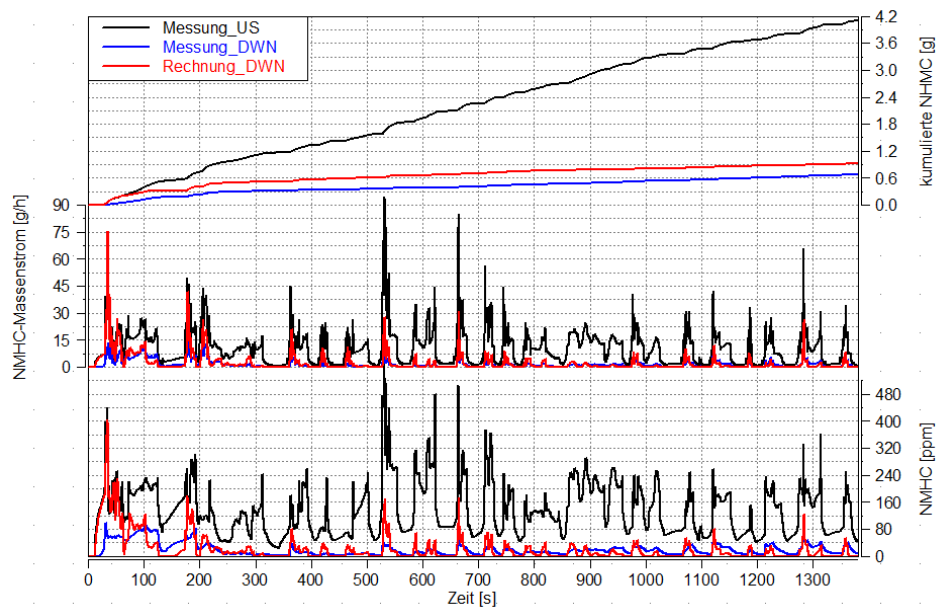


Abb. 4-3; NMHC-Konzentrationen Messungs-/Rechnungsvergleich für den DOC, mit Ausgangsbasis

In Abb. 4-4 sind die CO-Konzentrationen von Messung und Rechnung dargestellt. Der Vergleich zeigt eine geringe Abweichung aufgrund einer nicht berücksichtigten CO-Speicherung. Ansonsten wird die CO-Oxidation vom Modell gut abgebildet.

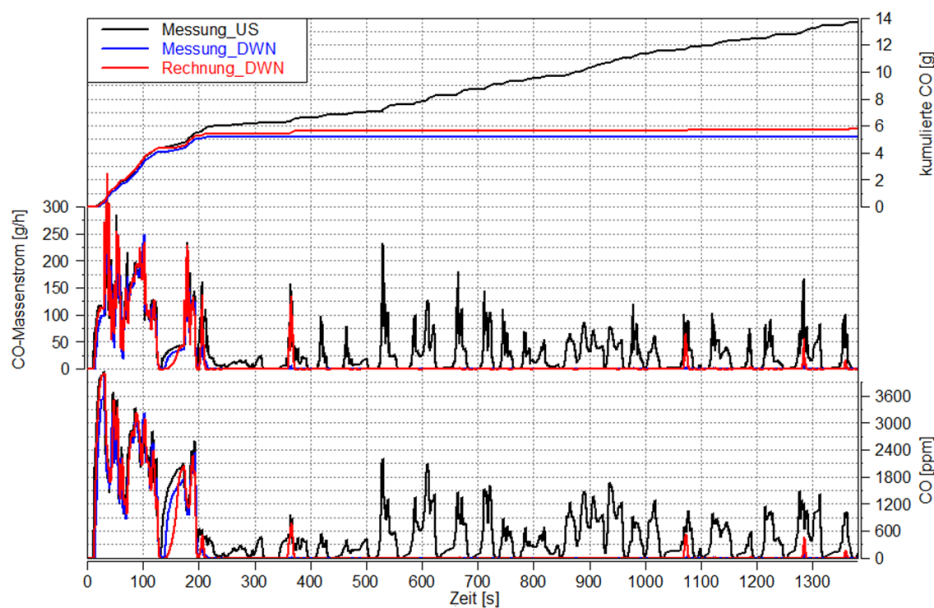


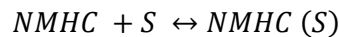
Abb. 4-4; CO-Konzentrationen Messungs-/Rechnungsvergleich für den DOC, mit Ausgangsbasis

Basierend auf dem gezeigten Stand der Parametrierung wurde das DOC-Modell erweitert. Zusätzlich zur Korrektur des Fehlers im Wärmeübergang wurde eine neue Reaktion in das Modell eingebunden, welche die NMHC-Speicherfähigkeit des DOCs beinhaltet. Neben den Änderungen im Modell wurden neue Ausgangskanäle hinzugefügt, um die Parametrierung zu unterstützen (Abb. 4-7). Diese Kanäle beinhalten die Temperaturen des DOCs direkt nach dem Eintritt (3te Zelle) „tkelFront“ und kurz vor Austritt (27te Zelle) „tkelEnd“ des Modells (Simulationsmodell ist aus 30 Zellen aufgebaut). Mit Hilfe dieser Temperaturen ist der Vergleich zwischen Messung und Rechnung einfacher durchzuführen, da



sich im DOC während den Messungen an ungefähr derselben Position Thermoelemente im Substrat befanden. Kurz nachdem das neue Modell für die Parametrierung der *NMHC*-Speicherfähigkeit angewandt wurde, mussten neue Ausgangskanäle im Modell hinzugefügt werden. Um die *NMHC*-Speicherung besser beurteilen zu können, ist es notwendig die aktuell gespeicherte *NMHC*-Menge zu kennen, dafür wurden die Ausgangsgrößen *thetaHCFront*, *thetaHCEnd* und *thetaHC* hinzugefügt, welche dem aktuellen Speicherzustand von *NMHC* zeigen (Wert Null bedeutet leer und 1 bedeutet voll).

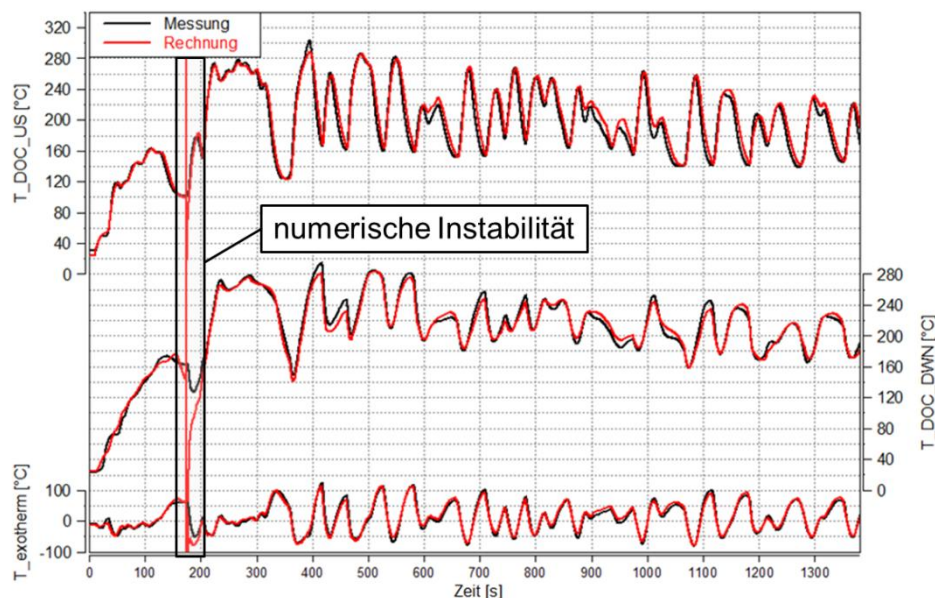
Die Schwierigkeit der *NMHC*-Speicherung bestand darin, dass keine speziell dafür geeigneten Messungen vorhanden waren, daher wurde versucht, auf Basis des kalten FTP72, die Speicherung zu parametrieren.



$$\dot{r}_{NMHC(S)} = K_{NMHC,st} * e^{\left(\frac{-E_{NMHC,st}}{T_{solid}}\right)} * [y_{NMHC}^L - y_{NMHC(S),Equ}]$$

$$Z_{NMHC} = Z_{NMHC,Max}(T_{solid}) * \frac{y_{NMHC(S),Equ}}{y_{NMHC(S),Equ} + K_{Equ} * e^{\left(\frac{-E_{Equ}}{T_{solid}}\right)}}$$

In diesen Formeln entspricht die Größe  $Z_{NMHC}$  der Oberflächenbedeckung. Die aktuelle *NMHC*-Bedeckung ist abhängig von der maximal möglichen Bedeckung  $Z_{NMHC,Max}$  und von den Gleichgewichtsbedingungen. Zu Beginn der Parametrierarbeit wurde ein erneuter Fehler bzw. ein Problem des Simulationsmodells ersichtlich. In Abb. 4-5 ist die Auswirkung des Problems im DOC-Modell dargestellt. Bei Sekunde 175 weist das Simulationsmodell eine numerische Instabilität auf, welche aus der gewählten Zeitschrittweite des Modells resultiert. Das aktuell verwendete Modell besitzt eine Rechenfrequenz von 2 Hz (festgelegt von AVL-Seite). Aufgrund dieses numerischen Problems musste die Zeitschrittweite von 2 auf 10 Hz angehoben werden, damit konnten die numerischen Instabilitäten durch den Einsatz des DOC-Modells vermieden werden.



**Abb. 4-5;** Temperaturspuren US/DWN\_DOC und Exotherme–numerische Instabilität 2 Hz DOC-Modell

Mit geänderter Zeitschrittweite konnte die Parametrierung fortgesetzt werden. Die Abstimmung der *NMHC*-Speicherung erforderte eine parallele Berücksichtigung der *NMHC*-Oxidation, da ansonsten eine

Beeinflussung die lokale *NMHC*-Konzentration durch Adsorption- und Desorption-Vorgängen stattgefunden hätte. Der Bereich unter ca. 120°C kann weitgehend der *NMHC*-Speicherung zugeordnet werden, dafür wurden *NMHC*- und *CO*-Oxidation deaktiviert. Während der *DOC* eine Temperatur unter 120°C aufweist, wurde die Adsorption von *NMHC* entsprechend der Messung parametrierung. Nachdem die *NMHC*-Spur von Messung und Rechnung in diesem Temperaturbereich abgestimmt war, wurden die *NMHC*- und *CO*-Oxidation wieder aktiviert. Die große Schwierigkeit lag nun darin die Desorption und Umsetzung von *NMHC* entsprechend den Messspuren zu parametrieren. Nach mehrmaliger Abstimmung dieser beiden Mechanismen konnte ein akzeptabler Parameterstand gefunden werden.

In Abb. 4-6 ist der Messungs-/Rechnungsvergleich für das *DOC*-Modell mit dem aktuellen Stand der *NMHC*- und *CO*-Oxidation sowie die *NMHC*-Speicherung dargestellt. Durch die *NMHC*-Speicherung ergibt sich eine Verbesserung in der Kaltstartphase.

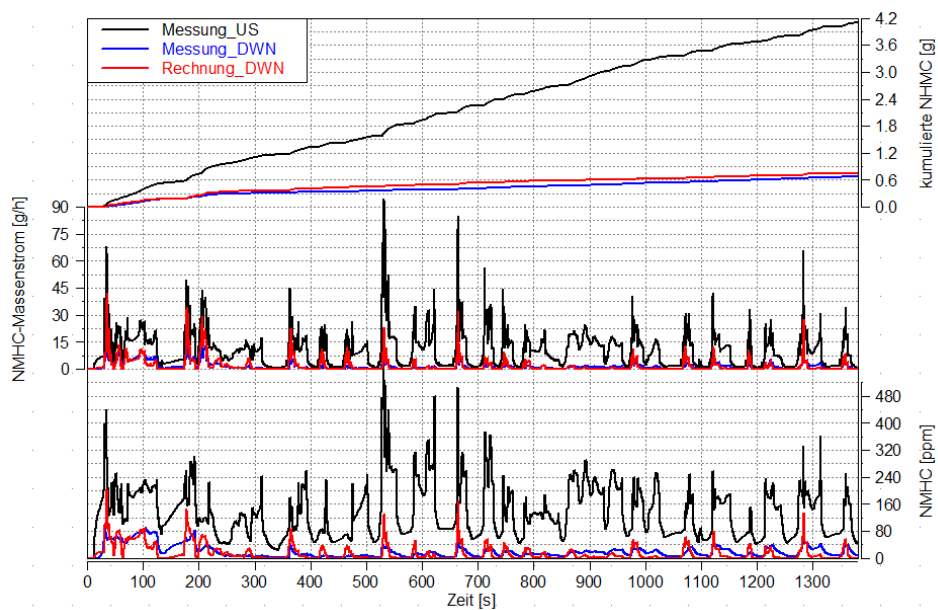


Abb. 4-6; *NMHC*-Konzentrationen Messungs-/Rechnungsvergleich, *DOC*-Modell mit Speicherfähigkeit

Die letzte Erweiterung des *DOC*-Modells beinhaltet die Reduktion von *CO* und *NMHC* durch *NO2*. Diese beiden Reaktionen sind notwendig, da aufgrund der Beschaffenheit des *DOC*s kaum *NO2* gebildet sondern ein großer Teil reduziert wird. In Abb. 4-7 ist der Entwicklungsstand der Ein- und Ausgangsgrößen des Simulationsmodells gezeigt.

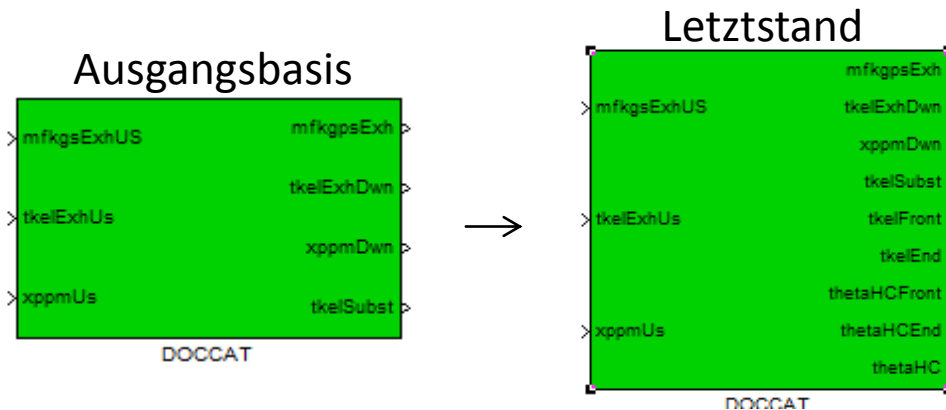
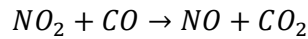
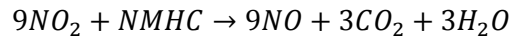


Abb. 4-7; *DOC*-Modell, Ausgangsbasis > Letztstand



Die dafür eingebunden Reaktionen der  $NO_2$ -Reduktion sind in den nachfolgenden Formeln angegeben. Der Formelaufbau entspricht derselben Struktur wie für  $CO$ - und  $NMHC$ -Oxidation.



$$\dot{r}_{NMHC} = \frac{k_1 * y_{NO_2}^L * y_{NMHC}^L}{[(1 + k_2 * y_{CO}^L) * (1 + k_3 * y_{NMHC}^L + k_4 * (y_{NO}^L)^m)]^2}$$

$$\dot{r}_{CO} = \frac{k_1 * y_{NO_2}^L * y_{CO}^L}{[1 + k_2 * y_{CO}^L + k_3 * y_{NMHC}^L + k_4 * y_{NO}^L]^2}$$

$$k_i = K_i(T = 573.15K) * e^{T_{A,i} * (\frac{1}{573.15} - \frac{1}{T_{solid}})}$$

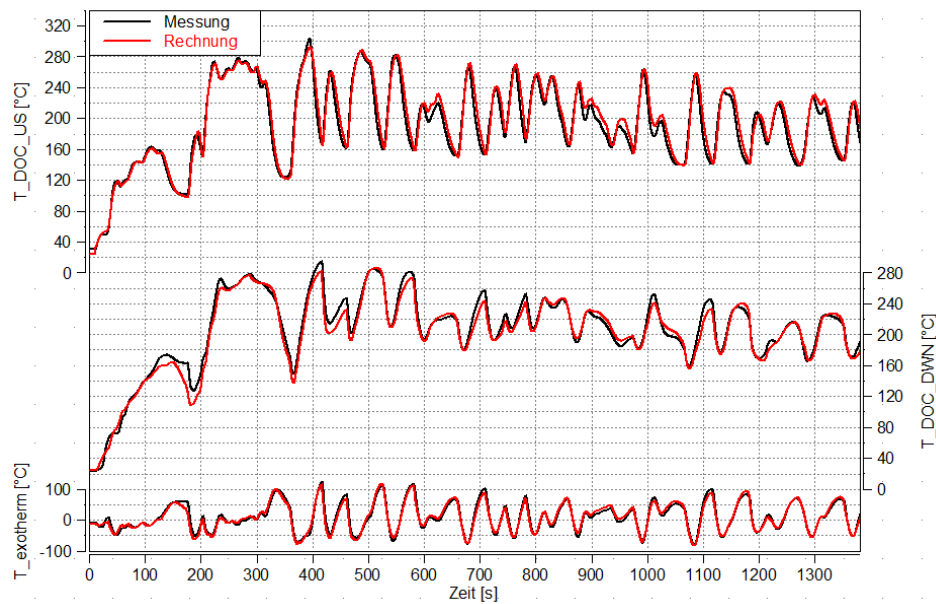
Die Parametrierung der  $NO_2$ -Reduktion durch  $CO$  und  $NMHC$  erwies sich als schwierig. Da es keine genaue Zuordnung gab in welchem Verhältnis  $CO$  und  $NMHC$  durch  $NO_2$  reduziert wird. Zu beachten war, dass bereits die gemessenen  $NO_2$ -Konzentrationen im Bereich von 0 bis 30 ppm vorlagen und durchschnittlich ein Niveau um 5 ppm erreicht wurde, hier spielt bereits die Messgenauigkeit einen wichtigen Rolle. Für die Parametrierung wurde die  $NO$ -Oxidation aktiviert und parallel zur  $NO_2$ -Reduktion abgestimmt.

#### 4.2.5 Verifizierung Messung/Rechnung

Abschließend wird für die Parametrierung ein Vergleich von Messung und Rechnung gezeigt und eventuelle Abweichungen erläutert. Der aktuelle Stand des hier verwendeten Modells umfasst folgende Reaktionen:

$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$	$CO$ -Oxidation	
$NMHC + \frac{9}{2}O_2 \rightarrow 3CO_2 + 3H_2O$	$NMHC$ -Oxidation	
$NO + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow NO_2$	$NO$ -Oxidation	
$NO_2 + CO \rightarrow NO + CO_2$	$NO_2$ -Reduktion durch $CO$	<i>neu</i>
$9NO_2 + NMHC \rightarrow 9NO + 3CO_2 + 3H_2O$	$NO_2$ -Reduktion durch $NMHC$	<i>neu</i>
$NMHC + S \leftrightarrow NMHC(S)$	$NMHC$ -Speicherung	<i>neu</i>

In Abb. 4-8 ist der Vergleich von Temperaturspuren zwischen Messung und Rechnung abgebildet, diese werden hauptsächlich durch die Materialparameter sowie  $CO$ - und  $NMHC$ -Oxidation beeinflusst. Die Darstellung zeigt die Temperaturen der Thermoelemente im vorderen und hinteren Teil des DOCs, diese entsprechen auch ungefähr der Ein- und Austrittstemperatur des DOCs.



**Abb. 4-8;** Temperaturspuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den DOC

In der Darstellung fallen Unterschiede im Zeitbereich von 100 bis 200 Sekunden auf. Diese Unterschiede sind auf eine unterschiedliche *NMHC*-Umsetzung zurückzuführen und konnten durch die Parametrierung nicht abgebildet werden, ansonsten wird die Temperatur durch das Modell gut abgebildet. Der Temperaturunterschied zwischen Ein- und Austritt wird durch die Größe  $T_{exotherm}$  gezeigt. Diese Größe berücksichtigt neben der thermischen Trägheit auch die Exotherme der ablaufenden Reaktionen.

In Abb. 4-9 wird den Vergleich der *CO*-Spuren zwischen Messung und Rechnung gezeigt. Stellenweise kommt es in der Simulation zu größeren Abweichungen, z.B. bei Sekunde 360 oder 1080, dort weist das DOC-Modell einen schlechten *CO*-Umsatz auf, der in der Messung nicht erkennbar ist. Die Ursache kann auf eine *CO*-Speicherung des DOCs zurückgeführt werden, da eine *CO*-Speicherfähigkeit bereits zu Beginn der Messung erkennbar ist. Eine weitere Erklärung dafür könnte ein Messfehler sein, dies wurde jedoch nicht angenommen. Der Unterschied in der Rechnung wirkt sich nur marginal auf die kumulierten *CO*-Emissionen aus und hat damit keinen großen Einfluss.

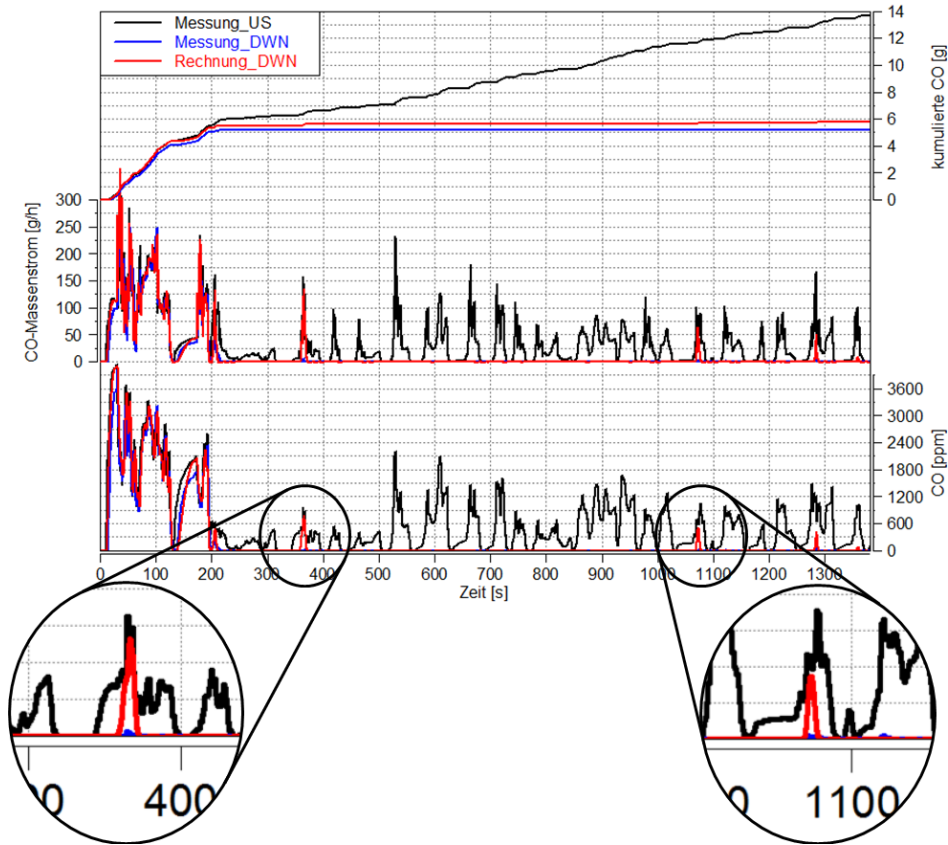


Abb. 4-9; CO-Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den DOC

In Abb. 4-10 sind die NMHC-Spuren dargestellt. Der Vergleich von Messung und Rechnung zeigt durchgängig kleinere Unterschiede. Bei der Messung von geringen NMHC-Konzentrationen ist darauf zu achten, dass durch Ablagerungen in der Messtechnik Messungenauigkeiten entstehen können. Diese Problematik bezieht sich sowohl auf die Messung mit CEB, wie auch auf die Messung mit dem FTIR, da die Messmethodik gleich ist. Generell fällt auf, dass der Verlauf der Messung im Vergleich zur Rechnung deutlich glatter aussieht.

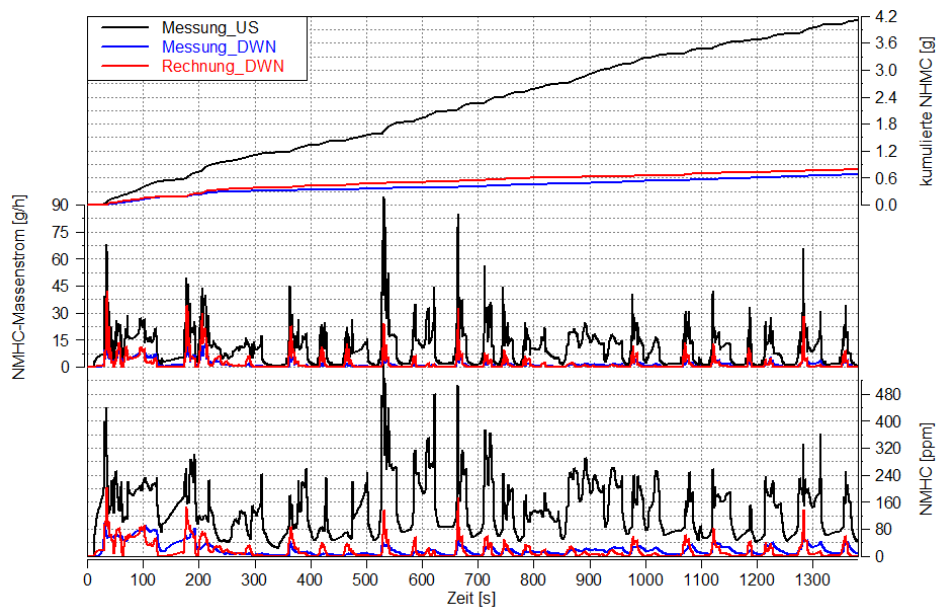


Abb. 4-10; NMHC-Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den DOC

Die Abb. 4-11 stellt die Emissionspuren von  $NO$ ,  $NO_2$  und  $NO_x$  dar. Wieder zu berücksichtigen ist, dass die Basis der Messung aus zwei unterschiedlichen Versuchen erstellt wurde. Ein Vergleich der  $NO_x$ -Emissionen zwischen Messung DOC-Eintritt und -Austritt zeigt die abweichenden Konzentrationen durch die Vorgehensweise. Die Messunsicherheit muss in diesem Fall ebenfalls berücksichtigt werden, da die gemessenen Konzentrationen sehr geringe Absolutwerte aufweisen. In den ersten 200 Sekunden kommt es durch den DOC zu einer vollständigen Reduzierung der  $NO_2$ .

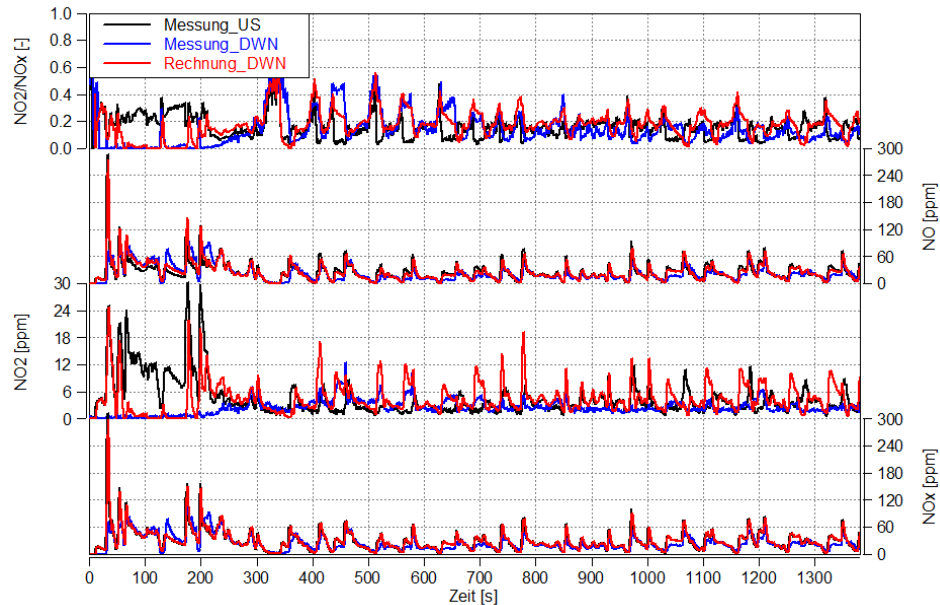


Abb. 4-11;  $NO$ -,  $NO_2$ - und  $NO_x$ -Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den DOC

Diese Tatsache kann jedoch nur teilweise durch die  $NO_2$ -Reduktion mit  $CO$  und  $NMHC$  abgebildet werden. Wie bereits im Kapitel 4.2.1 erwähnt, kann durch Vorhandensein von flüssigem  $H_2O$  eine geringe Menge  $NO_2$  gespeichert werden. Die Charakteristik kann mit Hilfe der in dem Modell verwendeten Reaktionen nicht abgebildet werden.

Durch Aufzeigen der genannten Unterschiede zwischen Messung und Rechnung wird die Qualität des gezeigten DOC-Modells ersichtlich. Eine Extrapolation des Modells kann nur begrenzt Aussage über das Realverhalten des DOCs geben, da exponentielle Ansätze verwendet wurden. Die hier dargestellte Rechenqualität kann nur im Wertebereich der durchgeführten Parametrierung sichergestellt werden. In Tab. 4-5 sind hierfür die Bereiche des DOC-Simulationsmodells angegeben.

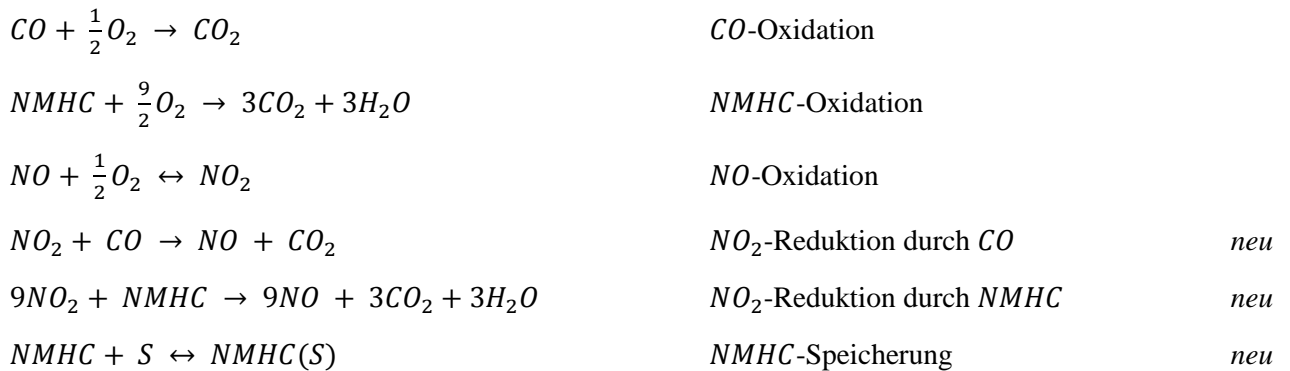
DOC-Eingangsgrößen	Wertebereich	Einheit
Temperatur	20-300	°C
Massenstrom	0-0.13	kg/s
$NMHC$ -Konzentration	0-520	ppm
$CO$ -Konzentration	0-4200	ppm
$NO_x$ -Konzentration	0-200	ppm

Tab. 4-5; Wertebereich der DOC-Parametrierung

Da die Vorgehensweise bei der Parametrierung von ECAT, DPF, sDPF und SCR zum großen Teil gleich wie beim DOC ablief, wird in den folgenden Kapiteln lediglich eine kurze Zusammenfassung angegeben.

### 4.3 ECAT-Parametrierung

Die Vorgehensweise für die ECAT-Parametrierung entspricht derselben wie für den DOC, da beide Simulationsmodelle dieselbe Basis besitzen. Wie Kapitel 4.2.4 zeigt, wurde auch das ECAT-Modell weiterentwickelt. Für das ECAT-Modell konnten die benötigten Daten direkt aus einem Versuch entnommen werden. Die hier abgebildeten Ergebnisse für den Messungs-/Rechnungsvergleich wurden mit der letzten Entwicklungsstufe des Simulationsmodells durchgeführt, die folgende Reaktionen umfasst:



Während der Parametrierung des ECAT-Modells wurde das Heizelement deaktiviert. In Abb. 4-12 sind die gemessenen sowie gerechneten Temperaturen bei ECAT-Eintritt und -Austritt dargestellt. Mit den verwendeten Materialparametern und Kinetik-Parametern für CO- und NMHC-Umsatz kann die Temperatur durch das Simulationsmodell gut abgebildet werden. Die Messung zeigt die Temperaturspuren der Thermoelemente vor ECAT-Eintritt und nach Austritt. Für die Rechnung wurden die Temperaturspuren an denselben Positionen verwendet.

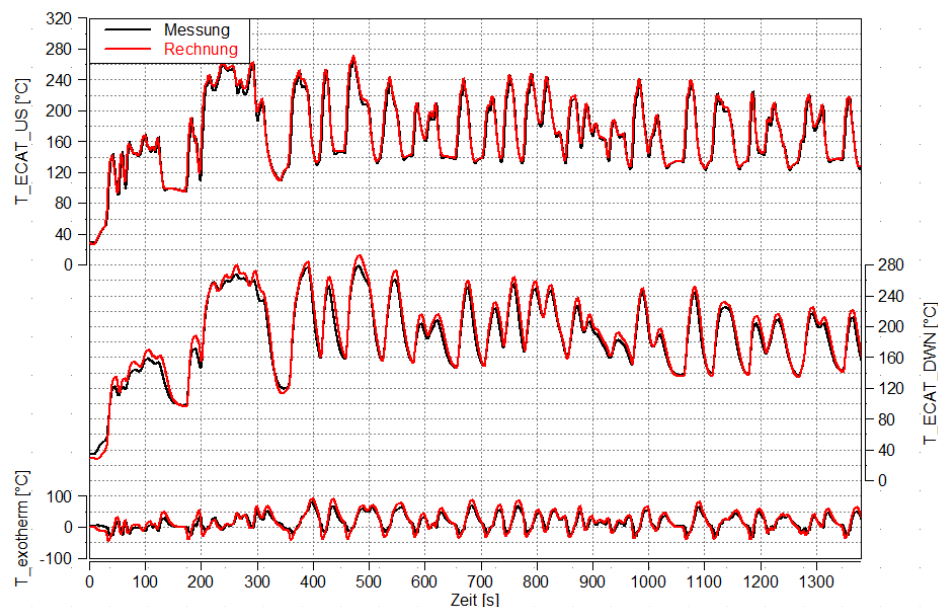


Abb. 4-12; Temperaturspuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den ECAT

Einen Vergleich zwischen Messung und Rechnung für die CO-Oxidation sieht man in Abb. 4-13. Mit den gefundenen Parameter für den CO-Umsatz kann die Messung gut abgebildet werden. Bezogen auf die kumulierten CO-Emissionen sind geringe Unterschiede zu erkennen, die im Bereich der gewünschten Toleranz liegen.

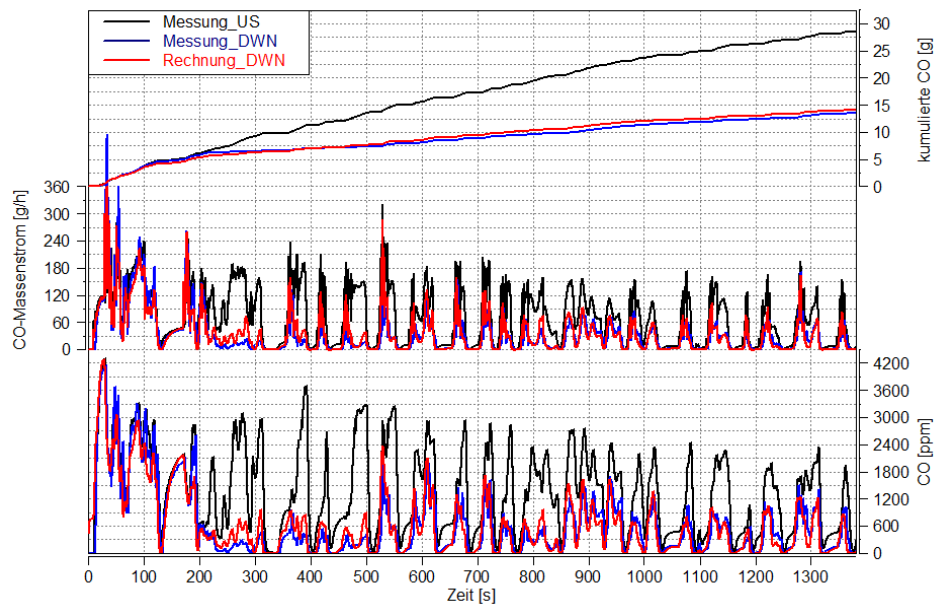


Abb. 4-13; CO-Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den ECAT

Für das ECAT-Modell konnte auch die *NMHC*-Oxidation zufriedenstellend parametriert werden. Dazu sind *NMHC*-Spuren für Messung und Rechnung in Abb. 4-14 dargestellt.

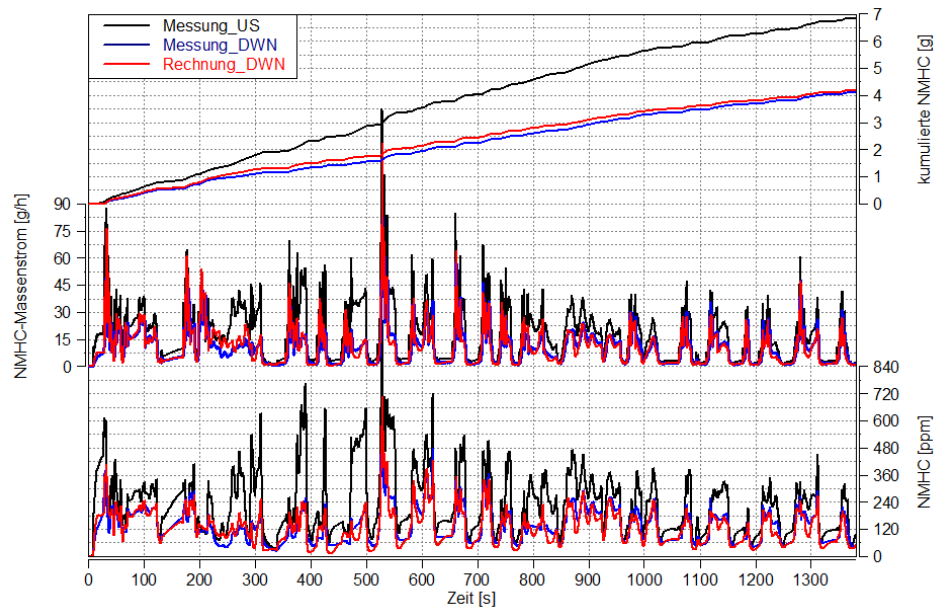
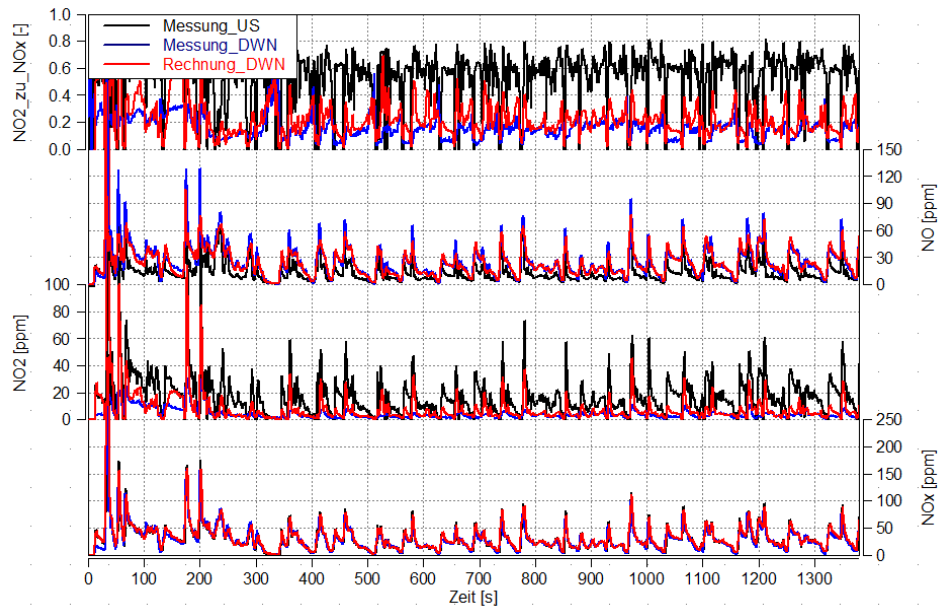


Abb. 4-14; *NMHC*-Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den ECAT

In Abb. 4-15 sind die Ergebnisse aus der *NO<sub>2</sub>*-Oxidation und Reduktion durch *CO* und *NMHC* gezeigt. Während der Kaltstartphase bis 200 Sekunden sind Unterschiede zwischen Messung und Rechnung erkennbar, die aufgrund der unterschiedlichen Messgeräte entstanden sind. Da bereits beim Vergleich der gemessenen *NO<sub>x</sub>*-Emissionen vor und nach ECAT in der Kaltstartphase Unterschiede erkennbar sind, ist eine genaue Beurteilung der *NO<sub>2</sub>*-Konzentrationen in den ersten 200 Sekunden nicht eindeutig möglich. Diese Unterschiede können direkt aus der Messtechnik oder aus Phänomenen stammen, die im Modell nicht berücksichtigt werden (z.B. *NO<sub>2</sub>*-Speicherung durch Wasser).



**Abb. 4-15;** *NO*-, *NO2*- und *NOx*-Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den ECAT

Wie bereits in Kapitel 4.2.5 erläutert wurde, kann auch für den ECAT ein Wertebereich angegeben werden, in dem die gezeigte Modellqualität erreicht wird (siehe Tab. 4-6).

ECAT-Eingangsgrößen	Wertebereich	Einheit
Temperatur	20-280	°C
Massenstrom	0-0.13	kg/s
<i>NMHC</i> -Konzentration	0-720	ppm
<i>CO</i> -Konzentration	0-4200	ppm
<i>NO<sub>x</sub></i> -Konzentration	0-200	ppm

**Tab. 4-6;** Wertebereich der ECAT-Parametrierung



### 4.4 cDPF-Parametrierung

Für das cDPF-Simulationsmodell musste eine Vereinfachung getroffen werden, da zusätzlich noch eine katalytisch wirkende Beschichtung berücksichtigt werden muss (ähnlich dem DOC). Dadurch können dieselben Reaktionen wie im DOC oder im ECAT ablaufen. Das Basis DPF-Modell ist nicht in der Lage diesen Umfang an Reaktionen zu berücksichtigen. Da eine Erweiterung dieser Funktionalitäten nicht möglich war, musste eine andere Lösung gefunden werden. Um die Eigenschaften des cDPFs mit einem Simulationsmodell abbilden zu können, wurde ein kleines DOC-Modell vor dem DPF-Modell in Serie geschaltet. Folgende Reaktionen wurden damit berücksichtigt:

$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$	CO-Oxidation	
$NMHC + \frac{9}{2}O_2 \rightarrow 3CO_2 + 3H_2O$	NMHC-Oxidation	
$NO + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow NO_2$	NO-Oxidation	
$NO_2 + CO \rightarrow NO + CO_2$	NO <sub>2</sub> -Reduktion durch CO	neu
$9NO_2 + NMHC \rightarrow 9NO + 3CO_2 + 3H_2O$	NO <sub>2</sub> -Reduktion durch NMHC	neu
$NMHC + S \leftrightarrow NMHC(S)$	NMHC-Speicherung	neu
$c_p + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO$	Ruß-Oxidation mit O <sub>2</sub>	
$c_p + O_2 \rightarrow CO_2$	Ruß-Oxidation mit O <sub>2</sub>	
$c_p + NO_2 \rightarrow CO + NO$	Ruß-Oxidation mit NO <sub>2</sub> (CRT)	
$c_p + 2NO_2 \rightarrow CO_2 + 2NO$	Ruß-Oxidation mit NO <sub>2</sub> (CRT)	

Für die Parametrierung der Ruß-Oxidation waren keine Messdaten vorhanden, deshalb wurde eine vorhandene Parametrierung für das DPF-Modell übernommen. Nachdem die einzelnen Reaktionen parametriert waren, wurde der Druckverlust anhand spezieller Messungen eingestellt. In Abb. 4-16 sind die Ergebnisse für den unbeladenem und beladenem (ca. 3g/Liter Ruß) DPF abgebildet. Die schwarz gekennzeichneten Größen entsprechen der Messung vor cDPF und blau dargestellt sind Größen nach cDPF. Die Rechenergebnisse für das cDPF-Modell sind rot und grün gekennzeichnet.

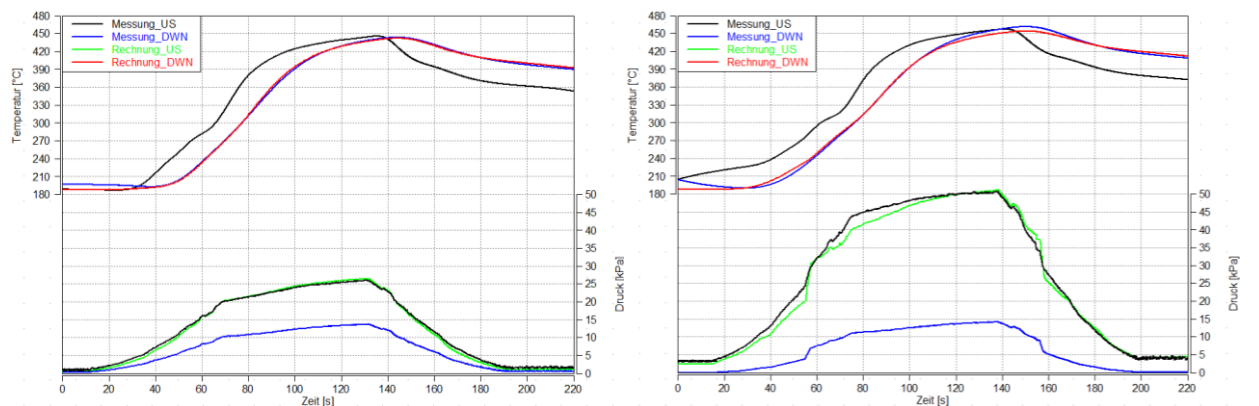


Abb. 4-16; Druckverlust cDPF, unbeladen (links) und beladen (ca. 3g/Liter, rechts), Messung vs. Rechnung

Wie in Abb. 4-16 zu sehen ist, wird die Temperatur durch das cDPF-Modell gut abgebildet. In Abb. 4-17 ist der Messungs-/Rechnungsvergleich der Temperaturen im FTP72 für den cDPF gezeigt.



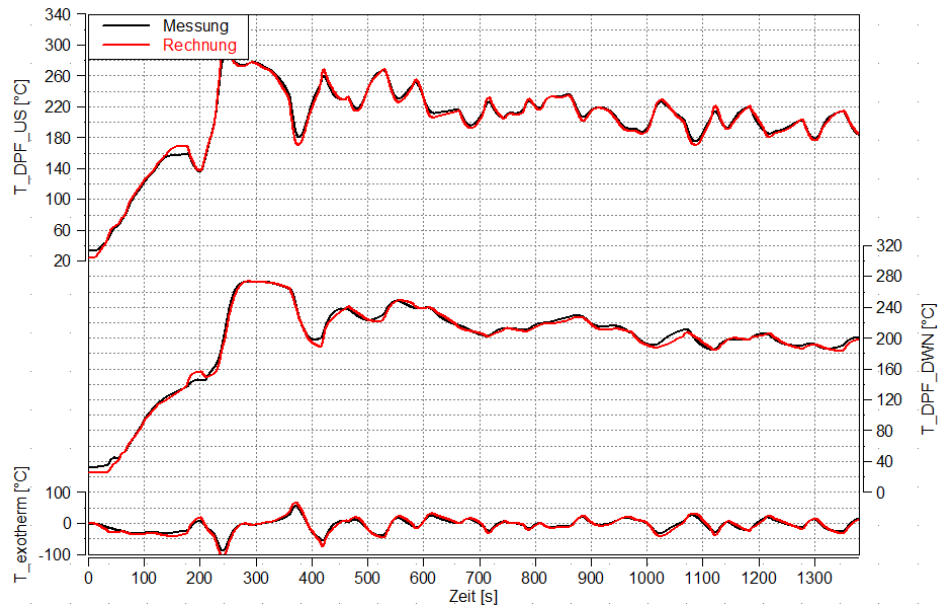


Abb. 4-17; Temperaturspuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den cDPF

Für den cDPF waren wiederum Thermoelemente im ersten und letzten Teil des Substrates vorhanden. Daher wurden für das cDPF-Modell die Temperaturen im ersten und letzten Bereich für die Gegenüberstellung verwendet, wie zuvor beim DOC-Modell.

Die CO-Oxidation spielt für den cDPF eine untergeordnete Bedeutung. Wie in Abb. 4-18 dargestellt wird, erreichen den cDPF nach 200 Sekunden keine nennenswerte CO-Konzentrationen. Zudem sind in der Messung höhere Ausgangs- als Eingangskonzentrationen für die CO-Emissionen erkennbar. Dieses Phänomen kann dadurch erklärt werden, dass das Messfile aus zwei unterschiedlichen Messungen erstellt wurde. Es kann eine Ruß-Oxidation ausgeschlossen werden, da in dieser Phase des Kaltstartes keine ausreichend hohe Temperatur vorliegt. Ansonsten wird die CO-Oxidation durch das cDPF-Modell ausreichend gut abgebildet.

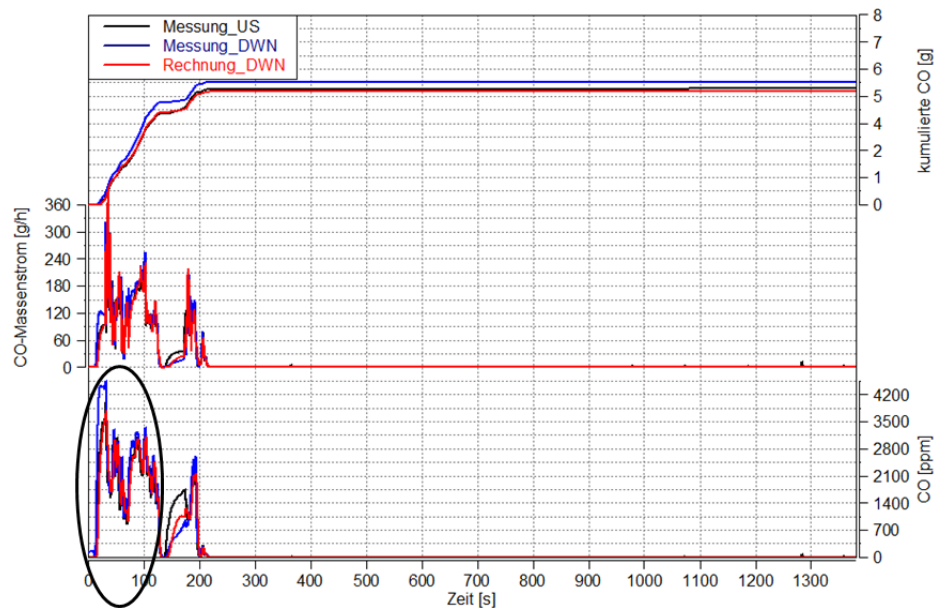


Abb. 4-18; CO-Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den cDPF

Auch bei den *NMHC*-Emissionen sind höhere Ausgangs- als Eingangs-Konzentrationen in der Messung erkennbar. Ursache dafür kann wiederum der Einsatz der beiden verwendeten Messungen sein oder auch eine Unsicherheit in der *NMHC*-Messung. Der Vergleich von Messung und Rechnung (Abb. 4-19) zeigt besonders während der Kaltstartphase größere Abweichungen. Generell kann angenommen werden, dass der cDPF ebenso wie der DOC und ECAT eine *NMHC*-Speicherfähigkeit besitzt. Diese Speicherung ist aus den verwendeten Messungen nicht erkennbar. Daher wurde für das cDPF-Modell eine *NMHC*-Speicherung angenommen. Nach etwa 250 Sekunden gibt es eine gute Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung.

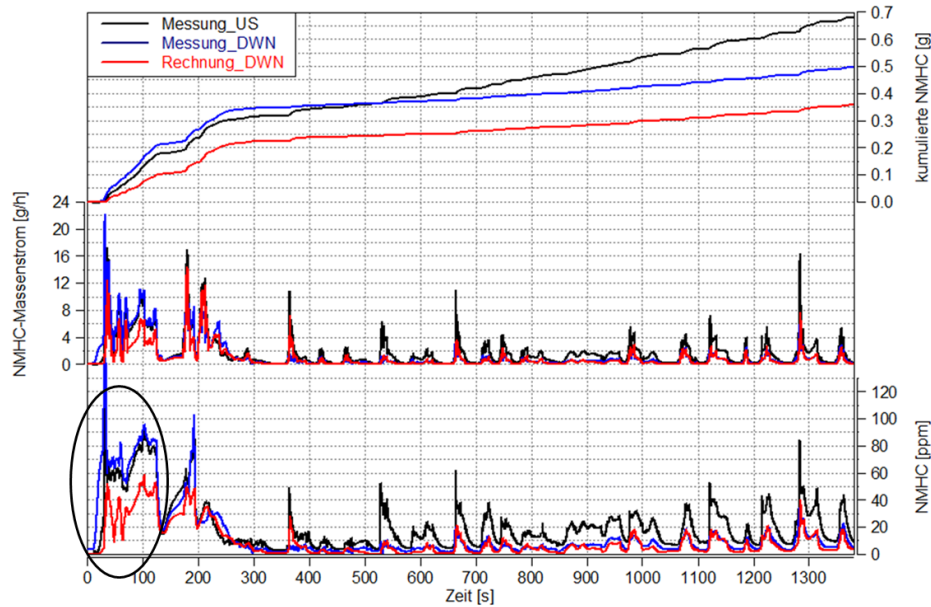


Abb. 4-19; *NMHC*-Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den cDPF

Wie bereits für *CO* und *NMHC* gezeigt wurde, treten auch bei den *NO*-, *NO2*- und *NOx*-Spuren während der Kaltstartphase Unterschiede in den Messungen auf. Ebenfalls muss berücksichtigt werden, dass das vorhandene *NO2*-Konzentrationsniveau sehr niedrig ist.

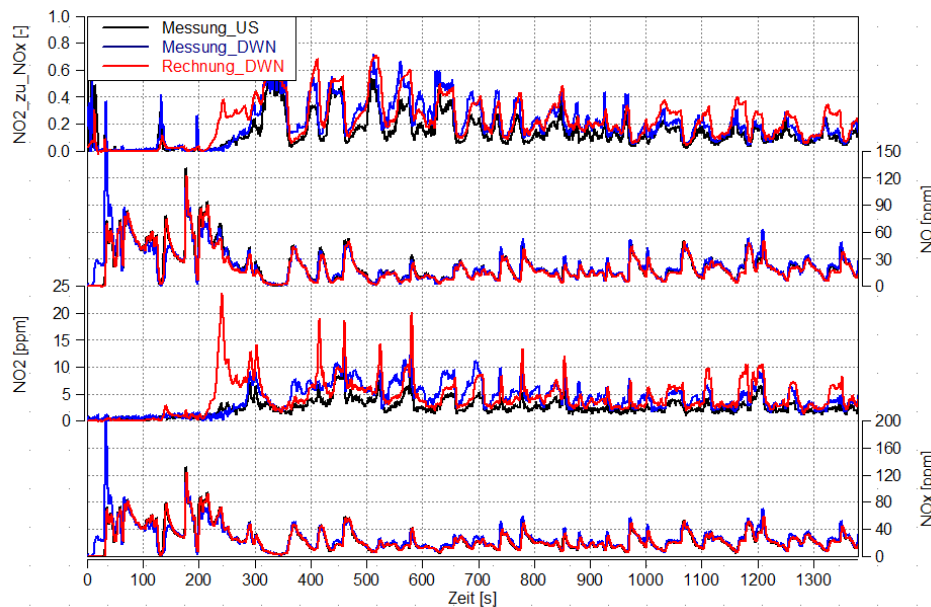


Abb. 4-20; *NO*-, *NO2*- und *NOx*-Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den cDPF

In Abb. 4-21 sind für den FTP72 die Drücke vor und nach ( $P_{US}$  und  $P_{DWN}$ ) cDPF abgebildet. Darin wird gezeigt, dass der Druckverlust mit dem Modell gut abgebildet werden kann.

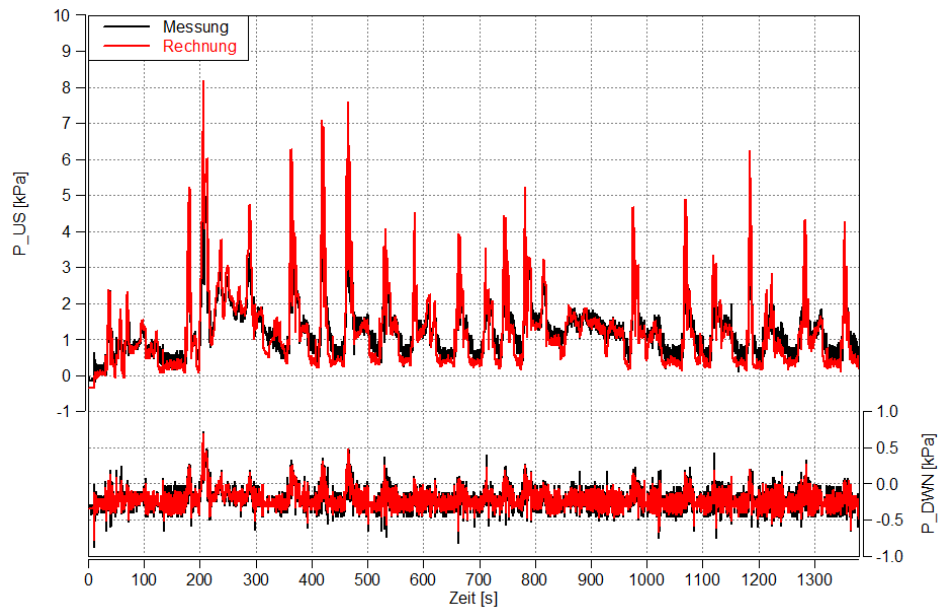


Abb. 4-21; Druck Messungs-/Rechnungsvergleich vor und nach cDPF

Den Gültigkeitsbereich der gezeigten Modellqualität für den cDPF ist in Tab. 4-7 eingetragen.

cDPF-Eingangsgrößen	Wertebereich	Einheit
Temperatur	20-300	°C
Massenstrom	0-0.13	kg/s
NMHC-Konzentration	0-120	ppm
CO-Konzentration	0-4200	ppm
NO <sub>x</sub> -Konzentration	0-200	ppm
Ruß Beladung	0-10	g
Druck am Austritt	0-10	kPa

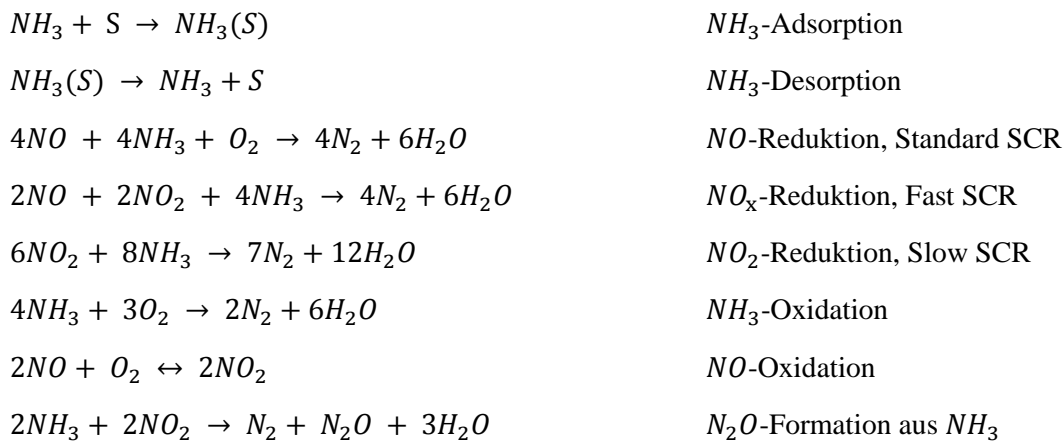
Tab. 4-7; Wertebereich der cDPF-Parametrierung

## 4.5 SCR-Parametrierung

Für die SCR-Parametrierung wurden sogenannte Charakterisierungsversuche verwendet. Diese Versuche werden folgendermaßen durchgeführt:

- Hochlastbetriebspunkt; damit sichergestellt wird, dass kein  $NH_3$  im SCR eingespeichert ist
- vordefinierter Betriebspunkt; entsprechend Massendurchsatz und SCR-Eintrittstemperatur
- Stabilisierungsphase; bis alle notwendigen Temperaturen konstant sind
- Start der Harnstoffdosierung mit definiertem  $\alpha$
- Warten bis  $NH_3$ -Durchbruch konstant

Aus diesen Messungen können alle Reaktionen für das SCR-Modell abgestimmt werden. Der Umfang der berücksichtigten Reaktionen für das SCR-Modell beinhaltet folgende Gleichungen:



Mit der Rechenschrittweite von 2 Hz traten numerische Instabilitäten im SCR-Modell auf (ähnlich wie bei der DOC-Parametrierung, Kapitel 4.2.4), daher wurde die Rechenfrequenz erneut von 2 auf 10 Hz angehoben. Damit wurde die Rechenzeit erhöht und außerdem musste die Parametrierung angepasst werden.

Die Ergebnisse der Abstimmungsarbeiten mit den Charakterisierungsversuchen für 200°C und 300°C sind in Abb. 4-22 und Abb. 4-23 dargestellt. Gezeigt werden  $NH_3$ -,  $NO$ -,  $NO_2$ - und  $NO_x$ -Konzentrationen sowie die Temperatur bei SCR-Eintritt. In der Messung sind an zwei Stellen Unstetigkeiten zu erkennen, deren Ursache auf den Umschaltvorgang der Switch-Box von vor SCR auf nach SCR beruhen.

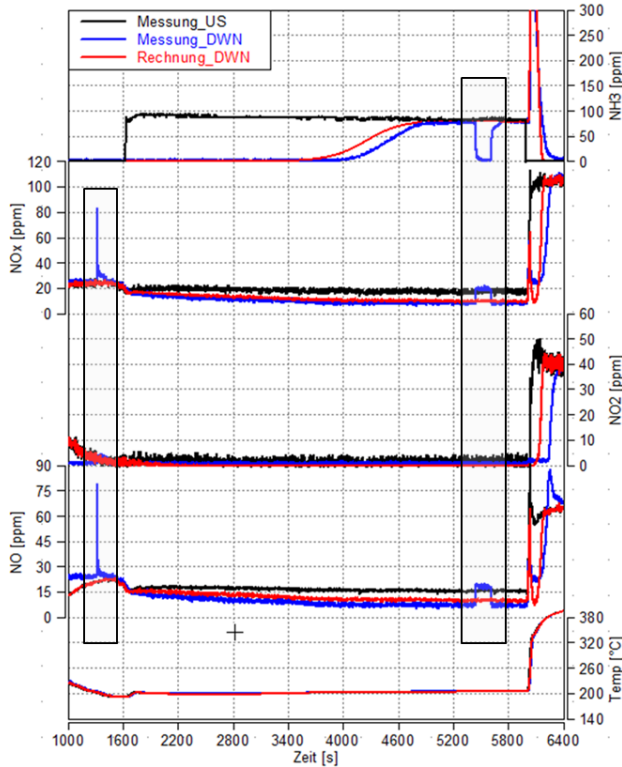


Abb. 4-22; Temperatur/NO/NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>/NH<sub>3</sub> Messungs-/Rechnungsvergleich für den SCR, 200°C

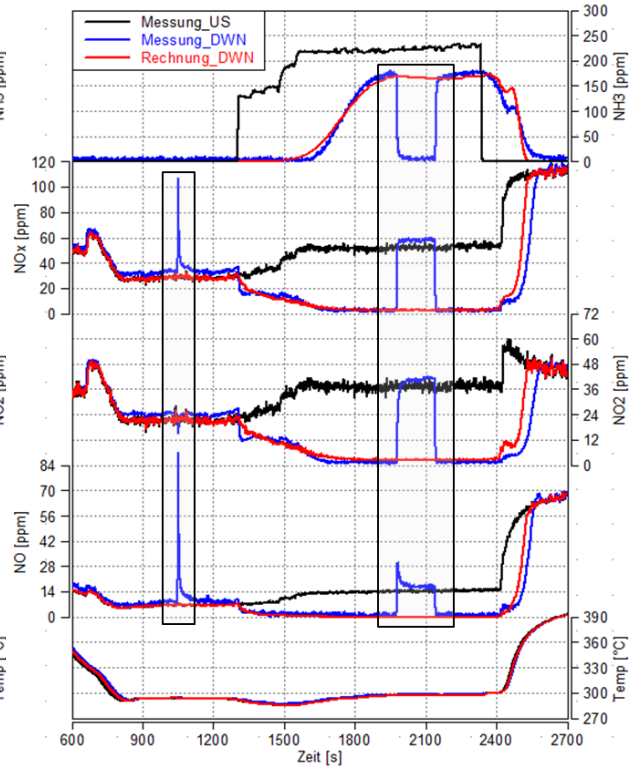


Abb. 4-23; Temperatur/NO/NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>/NH<sub>3</sub> Messungs-/Rechnungsvergleich für den SCR, 300°C

Zur Kontrolle wurde mit dem parametrierten SCR-Modell ein transienter Testzyklus gerechnet, dazu wurde ein warm konditionierter FTP72 herangezogen. Die Abb. 4-24 zeigt hierfür die thermischen Verhältnisse am SCR-Katalysator. Bis auf die ersten 100 Sekunden werden die Temperaturen vom SCR-Modell sehr gut abgebildet. Die Temperaturmessung der ersten 100 Sekunden wird vermutlich durch andere Phänomene beeinflusst, die aus den Messdaten heraus nicht erklärt werden konnte.

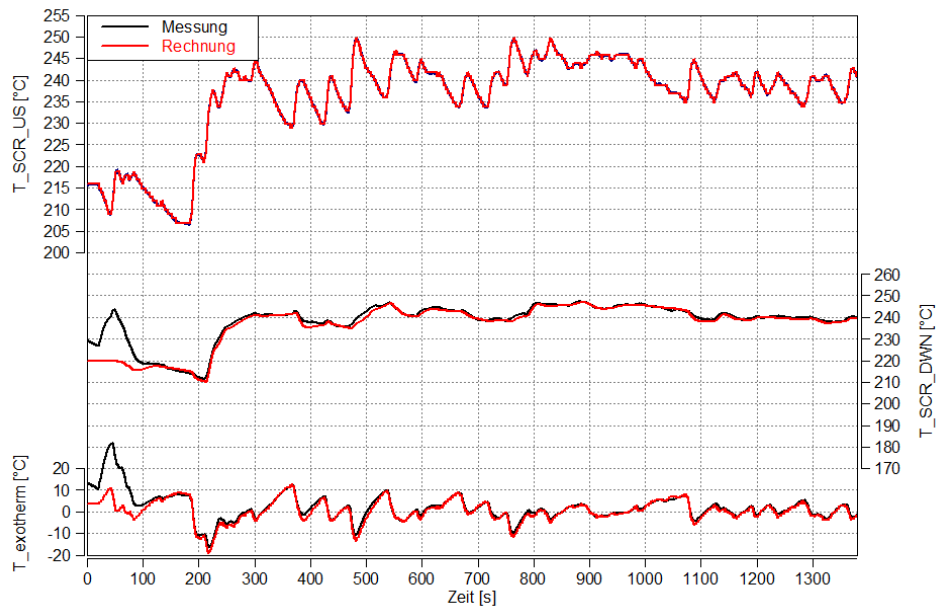


Abb. 4-24; Temperaturspuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den SCR

Das transiente Verhalten des SCR-Katalysators kann mit dem Simulationsmodell gut wiedergegeben werden (Abb. 4-25). Neben den  $NH_3$ -,  $NO$ -,  $NO_2$ -,  $NO_x$ - und  $N_2O$ -Konzentrationen ist der Massenstrom der Harnstoffdosierung „mf\_urea“ eingetragen. Die  $NO_x$ -Konvertierung sowie  $N_2O$ -Formierung stimmen für Messung und Rechnung gut überein. Es werden die geforderten Trends und auch Emissionsniveaus mit dem SCR-Modell erreicht. Der  $NH_3$ -Durchbruch aus der Messung stimmt ebenso mit dem der Simulation überein.

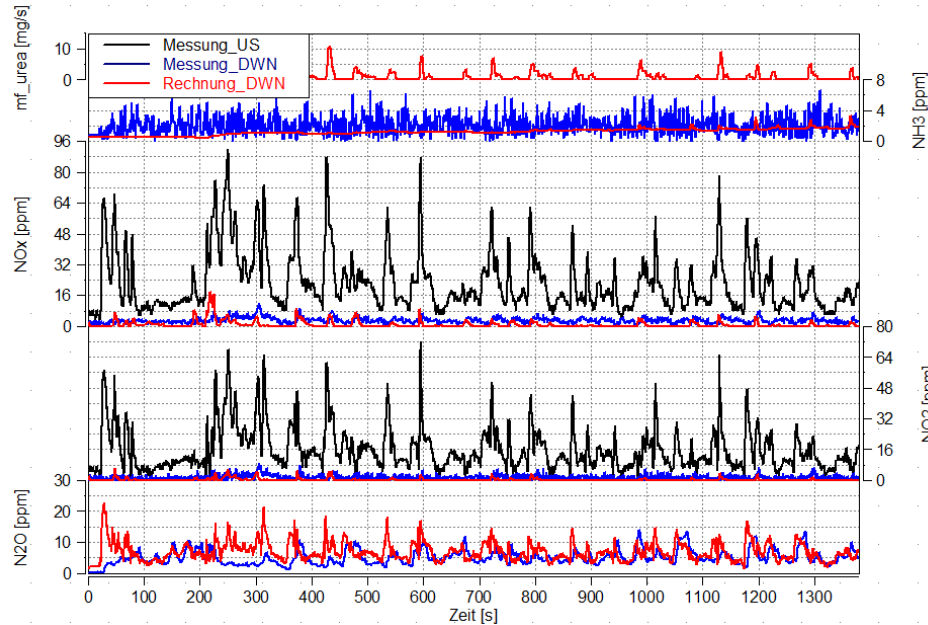


Abb. 4-25;  $NH_3$ -,  $NO$ -,  $NO_2$ -,  $NO_x$ - und  $N_2O$ -Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den SCR

Für die SCR-Parametrierung standen nur Versuche zur Verfügung, die bereits ein gewisses Temperaturniveau aufwiesen. Daher kann die erreichte Genauigkeit des SCR-Modells auch nur ab einer Temperatur von 200°C sichergestellt werden. Die entsprechenden Wertebereiche der Parametrierung sind in Tab. 4-8 ersichtlich.

SCR-Eingangsgrößen	Wertebereich	Einheit
Temperatur	200-400	°C
Massenstrom	0-0.07	kg/s
$NO_x$ -Konzentration	0-200	ppm
$N_2O$ -Konzentration	0-20	ppm

Tab. 4-8; Wertebereich der SCR-Parametrierung



## 4.6 sDPF-Parametrierung

Ein sDPF verbindet die Funktionen eines normalen DPFs und eines SCR-Katalysators. Mit diesem Ansatz wurde ein Simulationsmodell für den sDPF programmiert und für die Anwendung in dieser Arbeit eingesetzt. Die berücksichtigten Reaktionen im sDPF-Modell sind:

$NH_3 + S \rightarrow NH_3(S)$	$NH_3$ -Adsorption
$NH_3(S) \rightarrow NH_3 + S$	$NH_3$ -Desorption
$4NO + 4NH_3 + O_2 \rightarrow 4N_2 + 6H_2O$	$NO$ -Reduktion, Standard SCR
$2NO + 2NO_2 + 4NH_3 \rightarrow 4N_2 + 6H_2O$	$NO_x$ -Reduktion, Fast SCR
$4NH_3 + 3O_2 \rightarrow 2N_2 + 6H_2O$	$NH_3$ -Oxidation
$4NH_3 + 5O_2 \rightarrow 4NO + 6H_2O$	$NH_3$ -Oxidation
$2NO + O_2 \leftrightarrow 2NO_2$	$NO$ -Oxidation
$c_p + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO$	Ruß-Oxidation mit $O_2$
$c_p + O_2 \rightarrow CO_2$	Ruß-Oxidation mit $O_2$
$c_p + NO_2 \rightarrow CO + NO$	Ruß-Oxidation mit $NO_2$ (CRT)
$c_p + 2NO_2 \rightarrow CO_2 + 2NO$	Ruß-Oxidation mit $NO_2$ (CRT)

Die notwendigen Parameter für die Ruß-Oxidation mit Sauerstoff und Stickstoffdioxid wurden vom cDPF-Modell übernommen. Wie bereits für den SCR beschrieben wurde, ist die Parametrierung der SCR-Funktionen anhand spezieller Charakterisierungsversuche durchgeführt worden. Die Qualität der Charakterisierungsversuche war gerade ausreichend um die Parametrierung des Modells durchführen zu können. Wie beim SCR-Modell kam es auch beim sDPF-Modell zu numerischen Instabilitäten, wiederum musste die Rechenfrequenz von 2 auf 10 Hz angehoben werden.

Nachdem die Reaktionen für den sDPF parametriert waren, wurde der Druckverlust eingestellt. Dafür wurde, wie beim cDPF, ein Lastsprung mit unbeladenen und beladenen (ca. 3g/Liter Ruß) sDPF verwendet (Abb. 4-26). In den beiden Versuchen ist neben dem Druck auch die Temperatur vor und nach sDPF gegenübergestellt. Der Druck wie auch das thermische Verhalten kann mit dem Simulationsmodell gut abgebildet werden.

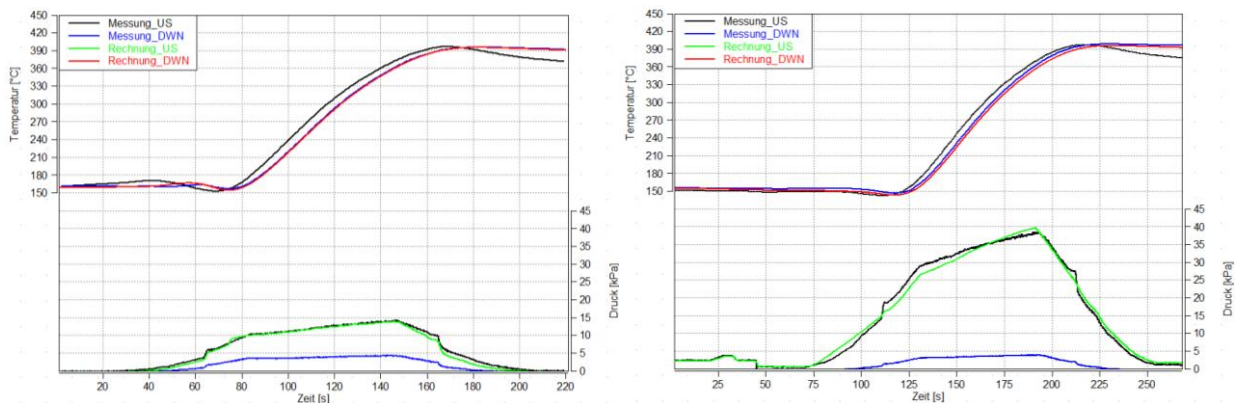


Abb. 4-26; Druckverlust sDPF, unbeladen (links) und beladen (ca. 3g/Liter, rechts), Messung vs. Rechnung

Die Ergebnisse der SCR-Reaktionen sind in Abb. 4-27 und Abb. 4-28 für 200°C und 350°C gezeigt. Die Abbildungen beinhalten die  $NH_3$ -,  $NO$ -,  $NO_2$ - und  $NO_x$ -Konzentrationen sowie die Temperaturen vor und nach sDPF von Messung und Rechnung. Das sDPF-Modell beinhaltet generell eine Schwachstelle der SCR-Reaktionen, die im  $NH_3$ -Durchbruch erkennbar ist. In den Ergebnissen ist gut zu erkennen, dass bereits nach kurzer Zeit ein konstanter  $NH_3$ -Schlupf erreicht wird, dass wiederum entspricht nicht der Realität. Grund dafür ist, dass die SCR-Reaktion nicht im gesamten sDPF-Modell stattfinden, sondern nur in einem Kanal (entweder Eingangs- oder Ausgangskanal). Damit kommt es zu fehlerhaften Adsorptions- und Desorptionsprozessen, diese Problematik wird später noch behandelt.

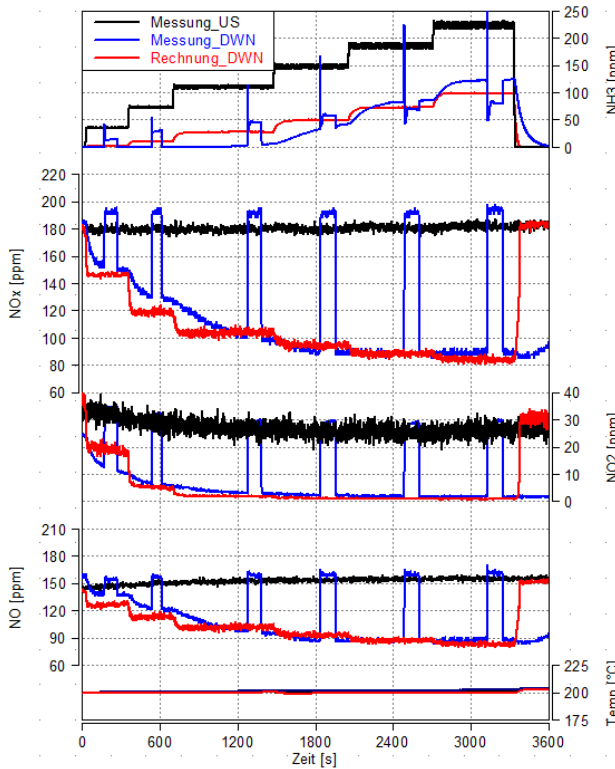


Abb. 4-27; Temperatur/ $NO/NO_2/NO_x/NH_3$  Messungs-/Rechnungsvergleich für den sDPF, 200°C

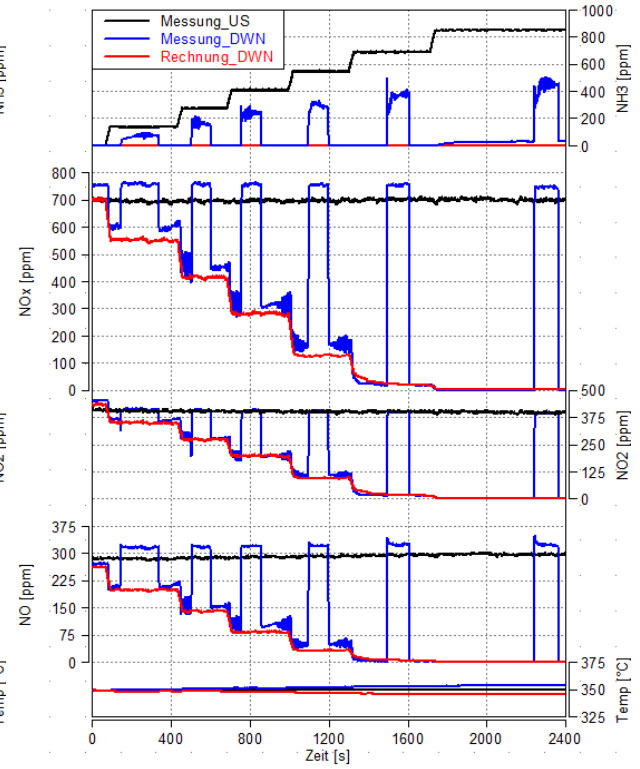


Abb. 4-28; Temperatur/ $NO/NO_2/NO_x/NH_3$  Messungs-/Rechnungsvergleich für den sDPF, 350°C

Das sDPF-Modell zeigt generell Schwächen in den Adsorptions- und Desorptionsprozessen von  $NH_3$ . Mit der Überlegung, dass dieses Simulationsmodell in der Konzeptstudie mit transient Spuren rechnen soll, wäre es besser einen Ersatz für das sDPF-Modell zu finden. Der Gültigkeitsbereich für das sDPF Modell ist Tab. 4-9 eingetragen.

sDPF-Eingangsgrößen	Wertebereich	Einheit
Temperatur	200-400	°C
Massenstrom	0-0.07	kg/s
$NO_x$ -Konzentration	0-800	ppm

Tab. 4-9; Wertebereich der sDPF-Parametrierung



## 4.7 Zusammenfassung Parametrierung der Einzelkomponenten

Im Zuge dieser Arbeit wurde neben der Modell-Parametrierung auch eine Modellentwicklung getrieben. Basierend auf den zur Verfügung gestellten Simulationsmodellen wurde anhand verschiedener Messungen die Reaktionskinetik der Modelle parametriert. Im Zuge der Modell-Abstimmung zeigten sich diverse Schwachstellen der unterschiedlichen vorhandenen Simulationsmodelle. Diese Schwachstellen umfassten neben numerischen Instabilitäten, fehlenden Reaktionen auch fehlende Transportlimitierungen. Ein weiterer Punkt der vorab nicht berücksichtigt wurde, war eine notwendige Anpassung der Parametrierung bei Änderung der Zeitschrittweite hin zu höheren Rechenfrequenzen, dadurch wurde die Rechenzeit der Modelle ebenfalls angehoben. Besonderes für das sDPF-Modell wirkte sich die Änderung der Rechenfrequenz von 2 Hz auf 10 Hz deutlich auf die Simulationszeit aus. Die zu Beginn von der AVL festgelegte Rechenfrequenz von 2 Hz musste für alle EAS-Modelle angehoben werden um numerische Instabilitäten ausschließen zu können. Eine generelle Transportlimitierung wird in den Simulationsmodellen nicht berücksichtigt, daher ist in der Rechnung eine Konvertierung von 100% erreichbar. Die notwendigen Reaktionen, wie *NMHC*-Speicherung und *NO2*-Reduktion, wurden von Seiten der AVL in die Modelle eingebunden.

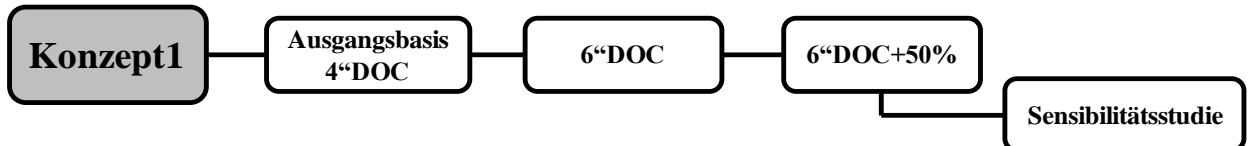
Aufgrund der Rahmenbedingungen wurden die einzelnen Modelle so parametriert, dass damit Trends richtig abgebildet werden konnten. Die erreichte Modellqualität ist nicht ausreichend um damit eine Katalysatorauslegung durchzuführen. Für DOC-, ECAT-, cDPF- und SCR-Modelle konnten die geforderten Ziele erfüllt werden, jedoch das sDPF-Modell zeigte Schwächen in der SCR-Funktionalität. Die *NH3*-Adsorption und -Desorption konnte mit den gewählten Ansätzen nicht korrekt abgebildet werden. Daher wurde beschlossen, ein ähnliches Modell wie für den cDPF (DOC+DPF) aufzusetzen. Es wurde das vorhandene SCR-Modell mit dem DPF-Modell in Serie geschaltet.

Die im Kapitel 4 abgestimmten Abgasnachbehandlungsmodelle wurden in der dargestellten Form für die nachfolgende EAS-Konzeptuntersuchung eingesetzt. Mit den vorhandenen Modellen wurden drei Systeme zusammengestellt und unterschiedliche Betriebsstrategien gerechnet. Auf Grundlage der ersten Ergebnisse wurden verschiedene Systemoptimierungen durchgeführt.

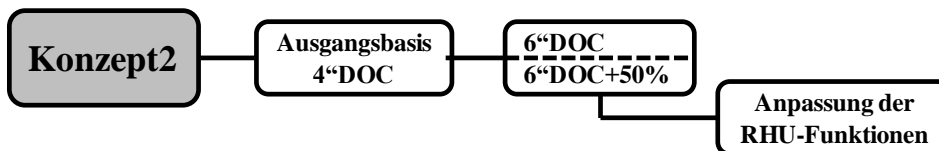
## 5 EAS-Konzepte (Exhaust Aftertreatment System)

Der Inhalt dieses Abschnittes umfasst die Bewertung unterschiedlicher EAS-Konzepte. Dazu wurden Betriebsstrategien und Parameter für die einzelnen Konzepte variiert und generelle Abhängigkeiten dargestellt. Es wurden dafür drei Konzepte aus den vorher parametrisierten EAS-Modellen erstellt und für damit verschiedene Untersuchungen durchgeführt:

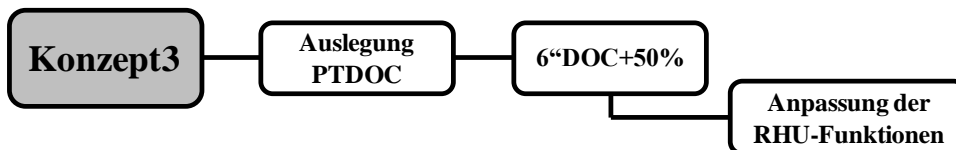
- **Konzept1**; bestehend aus ECAT-DOC-cDPF-SCRI-SCRII



- **Konzept2**; bestehend aus ECAT-DOC-sDPF-SCRI



- **Konzept3**; bestehend aus PTDOC-DOC- sDPF-SCRI



Der Systemaufbau der unterschiedlichen Konzepte wird in den entsprechenden Kapiteln noch detaillierter gezeigt. Zusätzlich zu den parametrisierten Abgasnachbehandlungsmodellen stand ein MoBEO-Modell vom Volvo I5D zur Verfügung. Das I5D-Modell (Abb. 5-1) beinhaltet neben dem System Motor auch eine Software-ECU, worin einige grundlegende Funktionen der Hardware-ECU abgebildet sind. Die beiden Blöcke Sensoren und Aktuatoren werden in der aktuellen Anwendung nur als Schnittstelle zwischen ECU und Motor-Modell verwendet.

Zu Beginn wurden die notwendigen EAS-Modelle für Konzept1 in das MoBEO-Modell eingebunden. Ursprünglich sollten die Konzeptuntersuchungen und Optimierungen mit dem Gesamtsystem (MoBEO+EAS-Modelle) durchgeführt werden, die Vorgehensweise wurde jedoch nach den ersten Rechenversuchen für das System1 verworfen. Durch die Anwendung des Gesamtsystems traten zwei grundlegende Probleme auf, welche neben einem erhöhten Rechenaufwand auch numerische Instabilitäten umfassten. Die Rechengeschwindigkeit wurde durch den Einsatz der EAS-Modelle im Motor-Modell mehr als halbiert, dabei stieg die Rechenzeit von 1.4-fache auf 0.6-fache Echtzeit. Wie bereits bei der DOC-Parametrierung gezeigt wurde, kam es stellenweise zu numerischen Instabilitäten, die von den EAS-Modellen verursacht wurden. Eine mögliche Lösungsvariante bestünde darin die Rechenfrequenz der einzelnen Modelle weiter anzuheben. Jedoch würde diese Maßnahme eine erneute Kontrolle und Anpassung der Parametrierung erfordern. Die Ursache für beide Probleme schien die Verwendung unterschiedlicher Zeitschrittweite zu sein. Das MoBEO-Modell verwendet in der Numerik variable Zeitschritte, wobei die EAS-Modelle mit konstanten Zeitschritten rechnen. Aufgrund fehlender Ressourcen musste ein anderer Lösungsweg eingeschlagen werden.

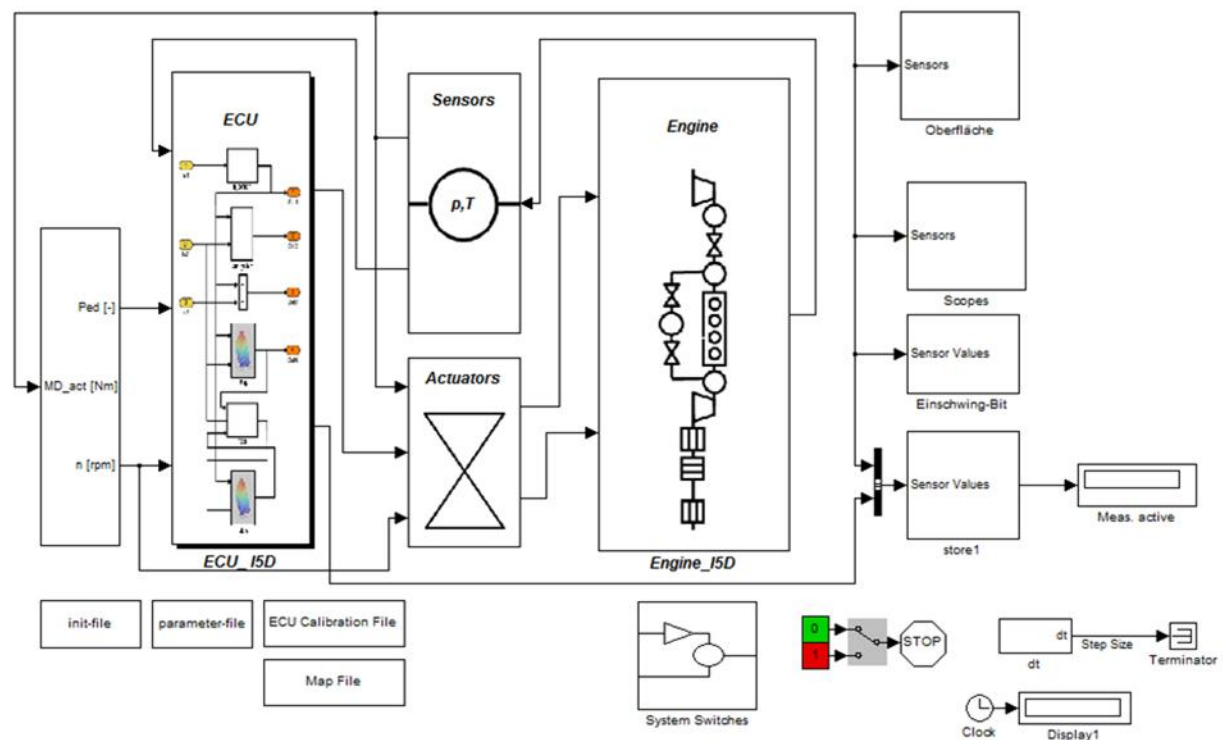


Abb. 5-1; Struktur des MoBEO-Modells für den Motor I5D

Der neue Lösungsweg bestand darin das Gesamtsystem in zwei Teilsystemen aufzugliedern. Dabei besteht das erste System aus dem MoBEO-Modell, das die Inputdaten für das zweite System generiert, indem die modellierte EAS-Konzepte dargestellt werden. Mit dieser Vorgehensweise konnten die Probleme, die durch die Anwendung eines Gesamtsystems entstehen, umgangen werden.

## 5.1 Vorgehensweise für Konzeptuntersuchung

Es wurden drei unterschiedliche Abgasnachbehandlungssysteme mit Hilfe eines transienten Testzyklus (FTP75) untersucht und optimiert. Dabei diente eine vorhandene Kalibrierung (EURO6-Kalibrierung) des MoBEO-Modells als Ausgangsbasis, welche drei unterschiedliche Betriebsmodi umfasst. Der erste Betriebsmodus beinhaltet den normalen Motorbetrieb und wird mit EOM0 (Engine Operation Mode) bezeichnet. Die beiden anderen Modi enthalten sogenannte RHU-Funktionen (Rapid Heat Up), die ein rasches Aufheizen des Abgasnachbehandlungssystems ermöglichen sollen und werden mit EOM1 und EOM2 bezeichnet. Neben dem raschen Aufheizen sollen EOM1 und EOM2 auch das Warmhalten des Abgasstranges gewährleisten. Zusätzlich zu den RHU-Funktionen unterstützt ein ECAT das Aufheizen und Warmhalten (Thermomanagement).

Die drei Betriebsmodi in der ECU unterscheiden sich in vieler Hinsicht voneinander. Es werden unterschiedliche Sollkennfelder für die unterschiedlichen EOMs verwendet, z.B. wird in EOM2 eine späte Nacheinspritzung bei ca. 90°kW nach OT eingesetzt um genügend HC für die Exothermie über den DOC bereitzustellen. Außerdem werden unterschiedliche Regelstrategien für die Luftmassenregelung eingesetzt. Die Luftmasse wird in Mode0 und 2 über das EGR-Ventil geregelt und in Mode1 über eine Drosselklappe nach dem Ladeluftkühler. Die bisher beschriebenen Charakteristiken der EOM sollen einen Einblick über den Umfang dieser Funktion geben und werden im Weiteren nicht näher ausgeführt.

Die am Prüfstand eingesetzte Betriebsstrategie umfasst den Einsatz des ECATs und der RHU-Funktionen. Der Einsatz des ECATs wird durch ein Kennfeld gesteuert, dessen Eingangsgrößen die Kühlmitteltemperatur und Temperatur nach ECAT sind. Als Funktion dieser Eingangsgrößen wird die prozentuelle Leistung des Heizelements ausgegeben. Die Steuerung der unterschiedlichen EOM erfolgt mit Hysterese-Schaltungen, die abhängig vom EOM, auf unterschiedliche Temperaturschwellen des EAS zugreift, die wiederum als Funktion der Kühlmitteltemperatur gestaltet sind. In Abb. 5-2 sind die Schwelltemperaturen für EOM1 (Temperatur nach ECAT) und EOM2 (Temperatur nach DOC) dargestellt, darin sind blau gekennzeichnet die Ausschaltsschwellen und rot abgebildet die Einschaltsschwellen. Die Abb. 5-2 zeigt, dass der EOM1 nur bis zum erstmaligen Erreichen von 280°C aktiv ist. Daher ist der EOM1 für die Konzeptuntersuchung von untergeordneter Bedeutung (siehe Einschaltsschwelle T\_EOM1\_LO).

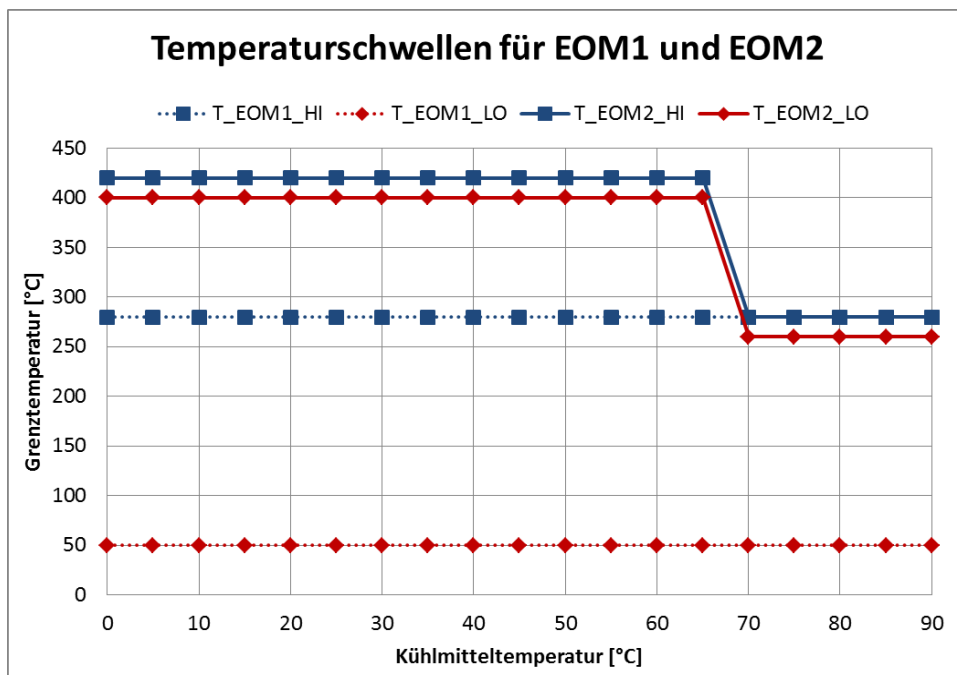


Abb. 5-2; Temperaturschwellen für EOM1 und EOM2

Zusätzlich ist in Abb. 5-3 die Hysterese-Schaltung des EOM2 dargestellt. Die Temperatur  $T_{61}$  entspricht der Austrittstemperatur des DOC und  $EngDa\_tEng$  entspricht der Kühlmitteltemperatur.

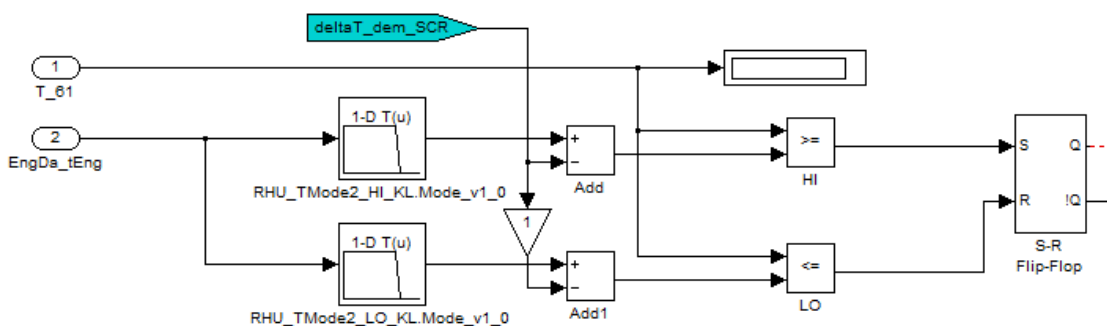


Abb. 5-3; Hysterese-Schaltung für EOM2

Für die Untersuchung unterschiedlicher Betriebsstrategien wurde auf die Schwelltemperaturen der EOM2-Hysterese ein absoluter Betrag addiert. Dieser Absolutbetrag wurde mit dem Parameter „deltaT\_dem\_SCR“ auf die Schwellwerte aufgebracht.

Die generelle Vorgehensweise der Konzeptuntersuchungen bestand darin, dass zu Beginn mit Hilfe des Motor-Modells die Spuren für das EAS-Konzept generiert wurden. Dazu wurden ECAT und DOC in das MoBEO-Modell eingebaut. Die damit verbundenen Probleme in der Numerik hatten keine gravierenden Auswirkungen auf die Rechenergebnisse des Motor-Modells. Danach wurden das EAS-System offline gerechnet.

Basierend auf der genannten Vorgehensweise wurden unterschiedliche Versuche gerechnet:

- Basis; Motormodell in EOM0 und ohne aktives Heizelement
- Nur ECAT; Motormodell in EOM0 und mit aktivem Heizelement
- Nur RHU; Motormodell mit RHU-Funktionen und ohne aktivem Heizelement
- RHU und ECAT; Motormodell mit RHU-Funktionen und mit aktivem Heizelement, Schwelltemperaturen für EOM2 wurden schrittweise variiert (-70, -40, -15, Basis, +20, +50, +80, +130)

Nachdem die Rechenergebnisse ausgewertet wurden, sind auf Basis der gewonnenen Erkenntnisse unterschiedliche Katalysatorgrößen sowie verbesserte Beschichtungen gerechnet worden. Für das Konzept1 wurde eine Sensibilitätsstudie durchgeführt, in der neben den Katalysatoren auch Rohrelemente angepasst wurden. Außerdem wurde für Konzept2 und 3 die Betriebsstrategie auf die Systemanforderungen angepasst.

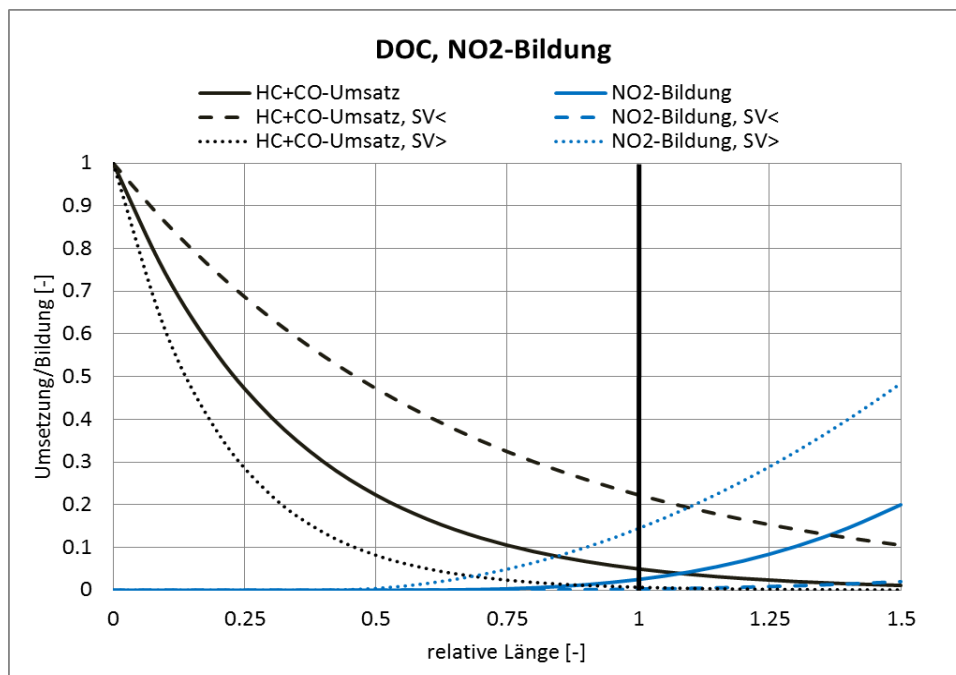


Abb. 5-4; Prinzipieller HC-,CO-Umsatz und NO<sub>2</sub>-Bildung in einem DOC

Vorab soll anhand von zwei Beispielen das grundlegende Verständnis der durchgeführten Systemoptimierung gezeigt werden. Um eine effektive Abgasnachbehandlung zu erhalten, sind einige Punkte zu beachten. Einerseits ist es wichtig die einzelnen EAS-Komponenten richtig zu dimensionieren, z.B. spielt die Größe des DOCs für die HC- und CO-Konvertierung sowie für die NO<sub>2</sub>-Bildung eine wichtige Rolle. In Abb. 5-4 ist für einen beliebigen Betriebspunkt die Charakteristik der HC- und CO-Konvertierung sowie die NO<sub>2</sub>-Bildung für unterschiedliche Raumgeschwindigkeiten (Spacevelocity) zu sehen. Erst nachdem der Großteil der HC und CO umgesetzt wurde, ist eine NO<sub>2</sub>-Bildung im DOC möglich.

Andererseits muss darauf geachtet werden, dass ein Anspringen der einzelnen Abgasnachbehandlungskomponenten rasch erreicht wird, damit hohe Konvertierungsraten erzielt werden können. Das Erreichen der Betriebstemperatur motornaher Komponenten stellt in den meisten Fällen kein größeres Problem dar. Wird jedoch ein Bauteil betrachtet, welches z.B. im Unterflurbereich eingebaut wird, stellt das Erreichen der notwendigen Temperaturen erhöhte Anforderungen an das System. In Abb. 5-5 ist der Einfluss der Eintrittstemperatur auf die  $NO_x$ -Konvertierung des verwendeten SCR-Modells gezeigt. Die abgebildete Konvertierung bezieht sich dabei auf die kumulierten  $NO_x$ -Emissionen. Hauptaussage dieser Darstellung ist, dass die Verwendung eines SCR-Systems immer ausreichend Temperatur benötigt um eine akzeptable  $NO_x$ -Konvertierung erreichen zu können.

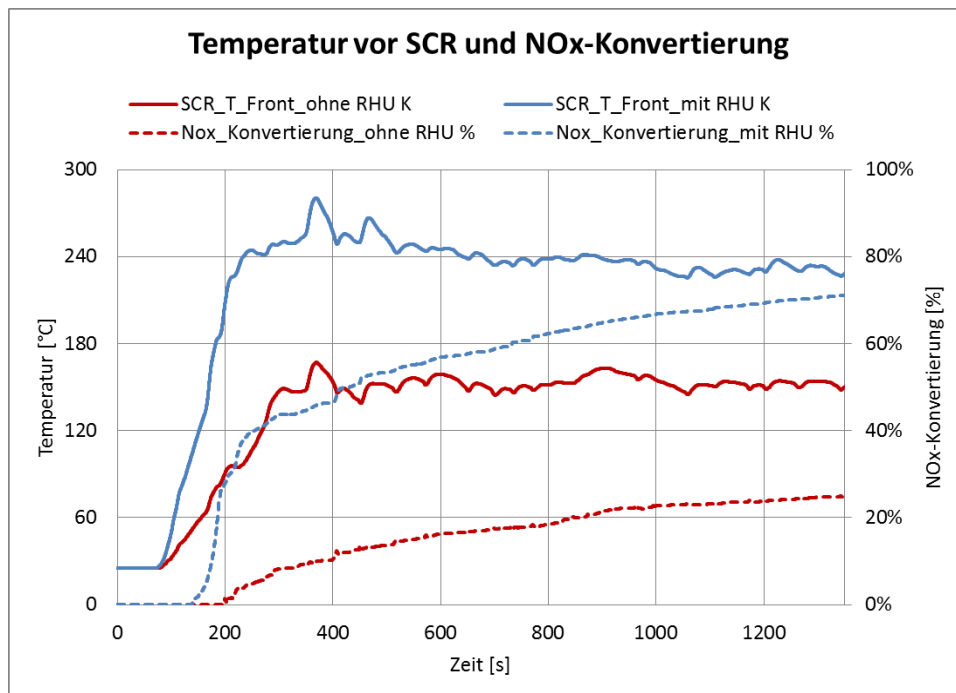


Abb. 5-5;  $NO_x$ -Konvertierung eines SCR-Systems, abhängig der Temperatur in einem FTP72

Aufgrund der temperaturabhängigen Effizienz des SCR-Systems muss eine Temperatur größer 200°C im SCR vorliegen, damit eine ausreichend hohe Konvertierung erreicht werden kann. Eine Anhebung der SCR-Temperatur kann auf unterschiedlichen Wegen erfolgen. Zum einen kann die Abgastemperatur über den ECAT angehoben werden und zum anderen kann man mit motorischen Maßnahmen eine Steigerung der Abgastemperatur erzielen. Die motorischen Maßnahmen sind hier in den RHU-Funktionen enthalten. Diese Funktionen umfassen neben einer direkten Anhebung der Temperatur im EM (Exhaustmanifold) auch eine indirekte Anhebung, diese resultiert aus den erhöhten  $CO$ - und  $HC$ -Konzentrationen, dafür muss eine oxidierende Oberfläche in Form eines DOC vorliegen, damit eine exotherme Reaktion ablaufen kann. Zusätzlich muss ausreichend  $NH_3$  für den SCR vorhanden sein, damit  $NO_x$  konvertiert werden kann. Neben ausreichend  $NH_3$  sollte auch ein günstiges  $NO_2/NO_x$ -Verhältnis vor SCR-System vorliegen, da generell gesagt werden kann, dass ein höheres  $NO_2/NO_x$ -Verhältnis (ca. 50/50 am SCR-Eintritt) die  $NO_x$ -Konvertierung verbessert.

Für die gesamten Untersuchungen wurde eine  $NH_3$ -Vorbeladung von rund 4g dem SCR-System aufgeprägt. Im Vergleich zur Hardware-Harnstoff-Dosierung wird in der Simulation immer 100%ige Harnstofflösung in  $NH_3$  umgewandelt und zusätzlich eine ideale Gleichverteilung angenommen.

## 5.2 Abgasnachbehandlungssystem1

Das System1 entspricht weitgehend dem Aufbau mit dem am Prüfstand längere Zeit gearbeitet wurde, aufgrund dieser Tatsache konnten die Messungen vom Prüfstand für die Validierung des EAS1 verwendet werden. Im Anhang ist der Messungs-/Rechnungsvergleich der Basis (ohne RHU und ohne ECAT) dargestellt. Die Abb. 5-6 zeigt den Aufbau des System1, das aus ECAT745, DOC730, DPF744 und SCRI736+SCR II740 aufgebaut ist. Der SCR II740 entspricht von der Charakteristik dem SCR I736. Die beiden Katalysatoren unterscheiden sich lediglich durch das Volumen bzw. den Länge (SCR I736 ist 4“ lang und SCR II740 ist 6“ lang). Zusätzlich besteht die Möglichkeit einen Slip-CAT einzusetzen. Dieser Slip-CAT ist in der Lage überschüssige  $NH_3$  mit  $O_2$  in  $H_2O$  und  $N_2$  umzuwandeln.

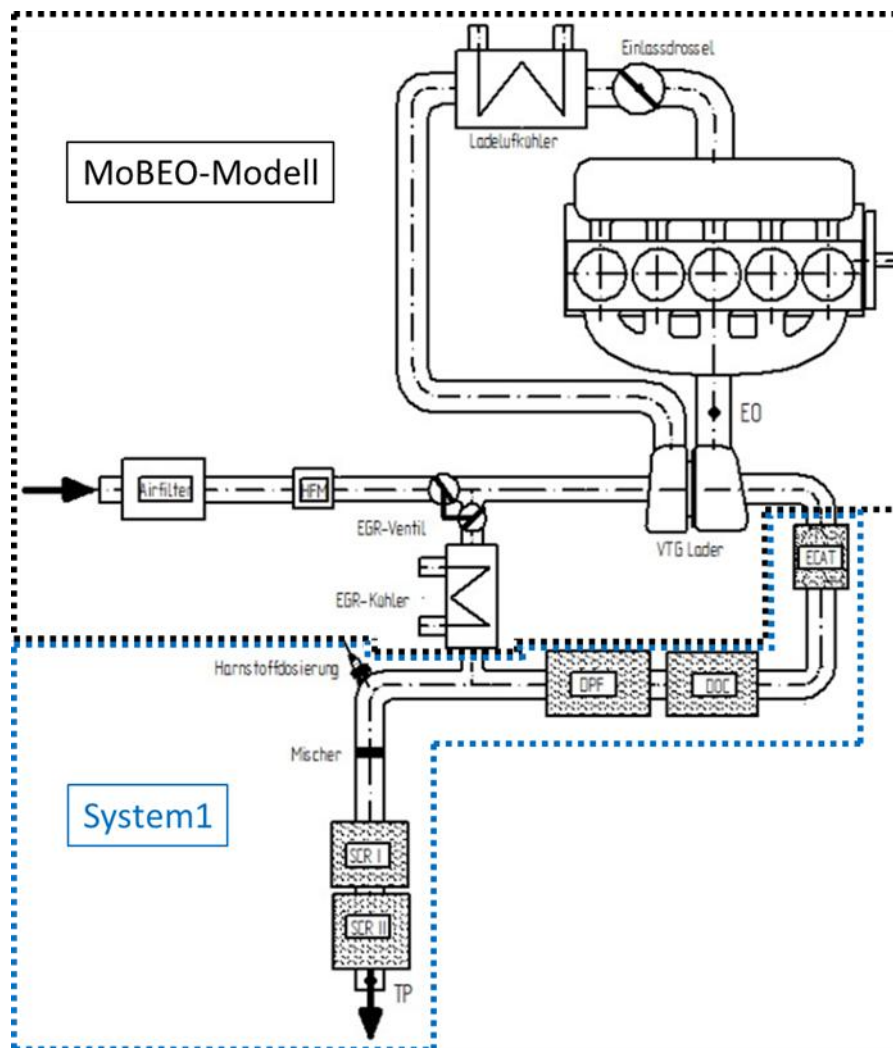


Abb. 5-6; Prinzipdarstellung Abgasnachbehandlungssystem1

In Tab. 5-1 ist ein Überblick der durchgeführten Variationsrechnungen angeführt, daraus ist auch die Vorgehensweise der Systemoptimierung ersichtlich. Zu erkennen ist, dass lediglich die Hardwarekomponenten variiert werden und keine Anpassung der RHU-Funktionen für Konzept1 durchgeführt wurde.

Bezeichnung	Beschreibung
Ausgangsbasis 4"DOC	Basis Konfiguration des System1
6"DOC	4" wurde durch 6"DOC ersetzt
6"DOC+50%	Reaktionskinetik des 6"DOCs um 50% angehoben
<b>Sensibilitätsstudie:</b> 6"DOC+50%, Parametervariation  6"DOC+50%, Optimum Parameter+6"DPF 6"DOC+50%, Optimum Parameter, 6"DPF, SCR+50%	Es wurden unterschiedliche Parameter des EAS1 variiert (Wärmeverluste, Wärmekapazitäten, DOC Trägermaterial). Mit Optimum der Parametervariation wurde der DPF von 8" auf 6" verkleinert. Optimum mit 6"DPF wurde die Effektivität des SCR um 50% angehoben.

Tab. 5-1; Durchgeführte Variationsrechnungen für System1

### 5.2.1 System1, Ausgangsbasis mit 4"DOC

Zu Beginn wurde das System1 mit der Basiskonfiguration gerechnet, wodurch die Ausgangsbasis für die weiteren Arbeitsschritte geschaffen wurde. Dafür sind folgende Simulationen für alle Variationsrechnungen (aus Tab. 5-1) durchgeführt worden:

- Basis ohne RHU und ohne ECAT
- Nur ECAT
- RHU und ECAT (Variation der Temperaturschwellen für EOM2)
- Nur RHU

Die Ergebnisse zu diesen Simulationen sind in Abb. 5-7 abgebildet. Zusätzlich sind die Grenzwerte für ULEV70, ULEV50 und SULEV eingetragen, diese beziehen sich auf die *NMHC+NOx*-Emissionen.

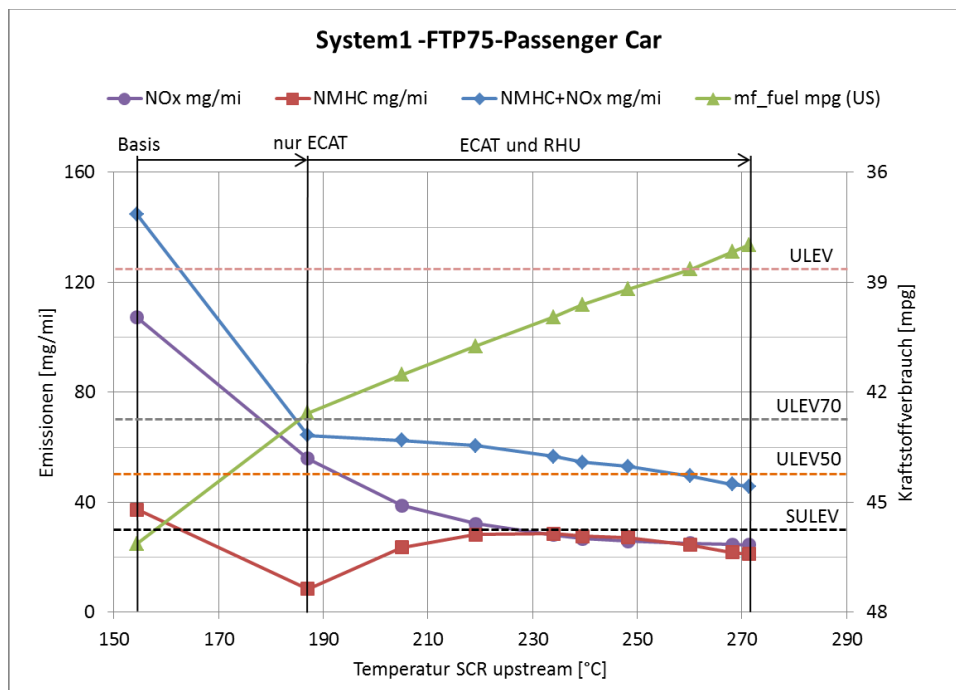


Abb. 5-7; Zyklusergebnisse System1 für FTP75 mit 4"DOC



Auf der x-Achse des Diagrammes ist die gemittelte SCR-Eintrittstemperatur aufgetragen und auf den beiden y-Achsen sind Zyklusergebnisse für  $NO_x$ -,  $NMHC$ - und  $NMHC+NO_x$ -Emissionen sowie der Kraftstoffverbrauch dargestellt. Auf die Darstellung der  $CO$ -Summenergebnisse wurde verzichtet, da diese weit unter den gesetzlich vorgeschriebenen Grenzwerten liegen.

Die Zyklusergebnisse beziehen sich auf die amerikanische Gesetzgebung (Emissionen in mg/mi und Kraftstoffverbrauch in mpg). Durch den Einsatz des ECATs ist es relativ einfach möglich, die geforderten Grenzwerte für ULEV70 zu erreichen, wohingegen die Auswirkungen der RHU-Funktionen etwas komplexer erscheinen. Diese Tatsache ist in den TP- $NMHC$ -Summenemissionen gut ersichtlich, da es durch die Anpassung der Schwelltemperaturen zu generell erhöhten TP- $NMHC$ -Emissionen kommt, die mit steigenden Temperaturen wieder besser werden. Dieses Phänomen wird später noch näher erläutert.

Wie bereits im Kapitel 5.1 erwähnt wurde, ist die Effizienz des SCR-Systems stark von der Temperatur abhängig, diese Abhängigkeit wird in den Simulationsergebnissen gut ersichtlich. In Abb. 5-8 sind abhängig von der SCR-Eintrittstemperatur die erreichten  $NO_x$ -Konvertierungen für die unterschiedlichen Versuche eingetragen. Im Basis-Versuch wird lediglich eine mittlere SCR-Eintrittstemperatur von  $155^\circ\text{C}$  erreicht, die mit dem vorbeladenen SCR-System eine  $NO_x$ -Konvertierung von ca. 25% erzielt. In der Basis-Simulation wird die notwendige Temperaturschwelle ( $180^\circ\text{C}$ ) für die AdBlue-Dosierung aufgrund des niedrigen Temperatur-Niveaus nicht erreicht. Der  $NO_x$ -Umsatz kommt nur durch die  $NH_3$ -Beladung des SCR-Katalysators zu Stande.

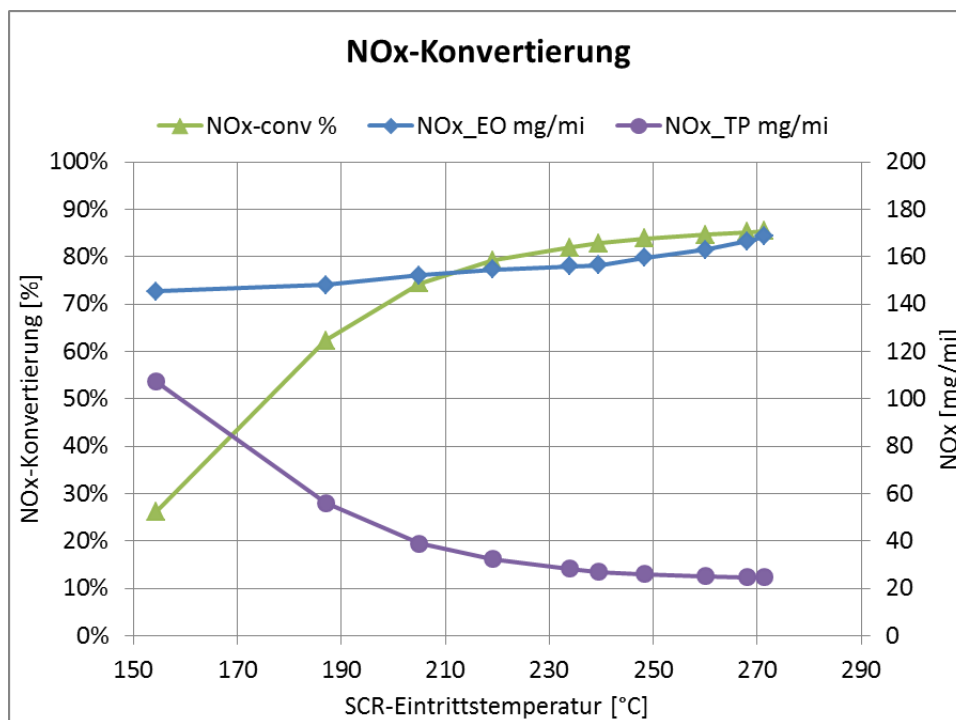


Abb. 5-8;  $NO_x$ -Konvertierung im FTP75 für System1 mit 4“DOC

Basierend auf den Zyklusergebnissen wurden bestimmte Phänomene näher betrachtet. Da der Einsatz des aktiven Heizelements einen großen Einfluss auf die kumulierten Ergebnisse der  $NO_x$ - und  $NMHC$ -Emissionen hat, wird die Wirkungsweise des ECATs anhand der Abb. 5-9 erklärt werden. In dieser Darstellung werden die beiden Versuche „Basis“ und „nur ECAT“ miteinander verglichen, indem die Temperaturen und  $NMHC$ -Emissionen vor und nach ECAT dargestellt werden. Schwarz sind jeweils die Eingangsgrößen, rot die Ausgangsgrößen für den „Basis“-Versuch und grün die Ausgangsgrößen für

den „nur ECAT“-Versuch markiert. Der Unterschied in den Eingangstemperaturen und *NMHC*-Eingangskonzentrationen basiert auf dem elektrischen Heizbedarf des ECATs, da die elektrische Leistung für das Heizelement von der Lichtmaschine bereitgestellt wird. Aufgrund der Lastpunktverschiebung durch die Lichtmaschine kommt es zu einer Absenkung der *EO-NMHC*-Emissionen. Durch den Einsatz des ECATs wird das Temperaturniveau für das gesamte System angehoben und aufgrund dessen kann das Abgasnachbehandlungssystem effizienter arbeiten. Besonders nach dem Kaltstart zeigt der ECAT seine Vorteile, da bereits nach wenigen Sekunden ein ausreichend hohes Temperaturniveau vorliegt, damit *CO* und *NMHC* umgesetzt werden kann.

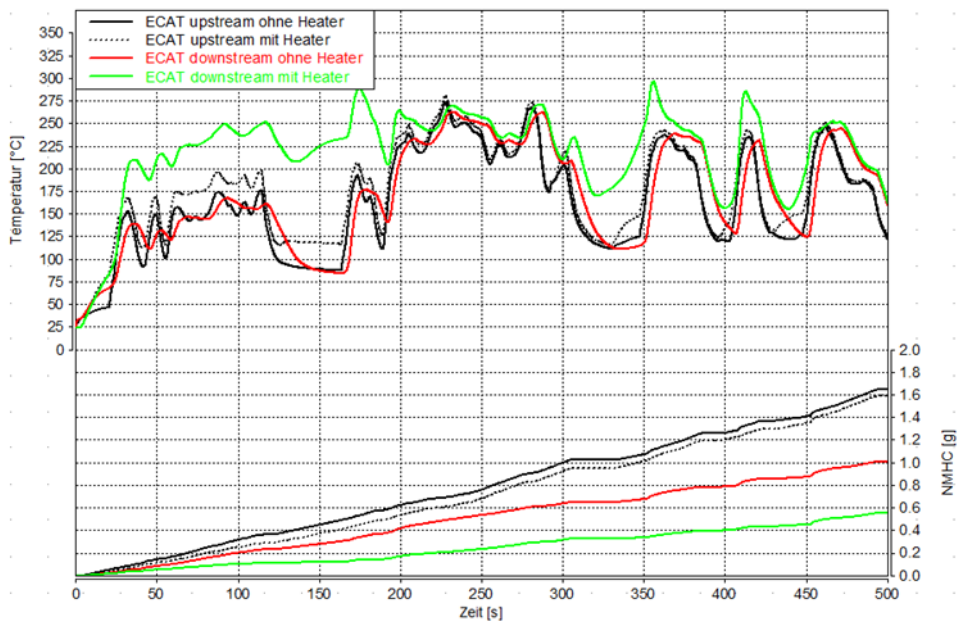


Abb. 5-9; Vergleich *NMHC*-Emissionen vor und nach ECAT

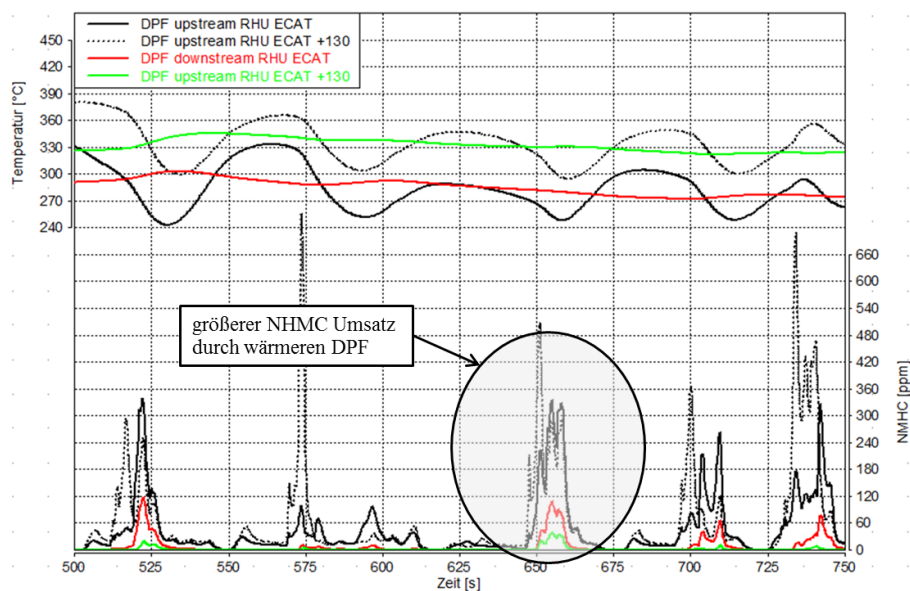
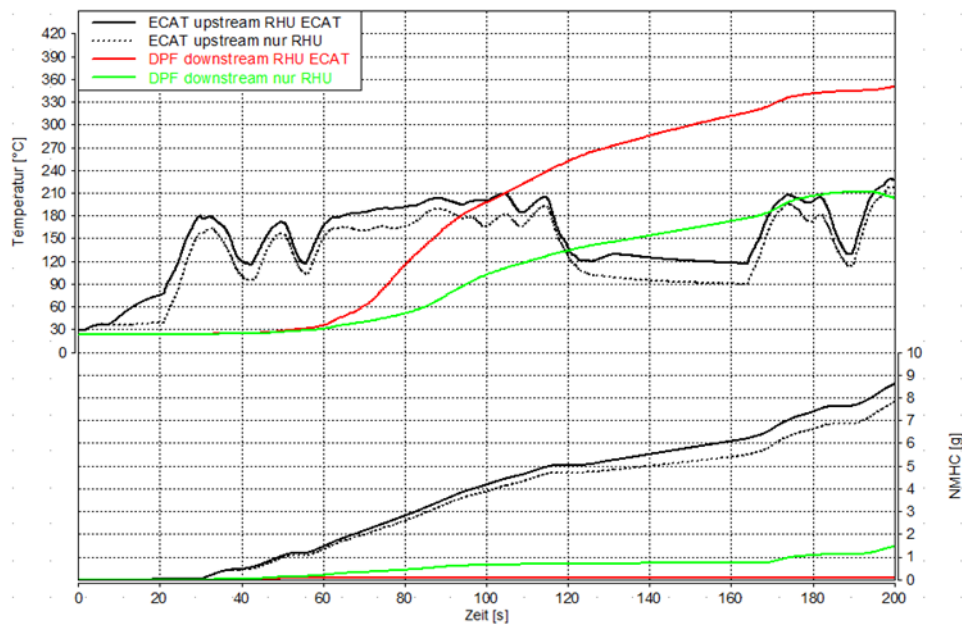


Abb. 5-10; *NMHC*-Umsatz von DPF bei erhöhter Temperatur

Wie in den Ergebnissen (Abb. 5-7) zu erkennen ist, sinken die *TP-NMHC*-Emissionen mit steigender *SCR*-Eintrittstemperatur. Diese Senkung der *NMHC* basiert auf der steigenden Effizienz des DPFs. Aufgrund der katalytischen Beschichtung des verwendeten DPFs ist dieser ebenfalls in der Lage *CO* und

*NMHC* umzusetzen. Die Abb. 5-10 zeigt deutlich die verbesserte *NMHC*-Konvertierung aufgrund der höheren Temperatur in den beiden Versuchen „RHU ECT“ und „RHU ECT+130“. Die Beschreibung der Abbildung entspricht derselben wie für Abb. 5-9.

In den Darstellungen der Ergebnisse wurden die Resultate aus den Versuchen „nur RHU“ ausgenommen, diese Entscheidung beruhte auf den inakzeptablen TP-*NMHC*-Zyklusergebnissen. Die *NMHC*-Konzentrationen zeigt Abb. 5-11, darin sind die Temperaturen und kumulierte *NMHC*-Emissionen vor ECAT sowie nach DPF in den ersten 200 Sekunden für die beiden Versuche „nur RHU“ und „RHU ECT“ dargestellt. Aufgrund der fehlenden Temperaturerhöhung durch das Heizelement des ECATs kann das System1 die *NMHC* in dieser Phase des Zyklus nicht umsetzen.

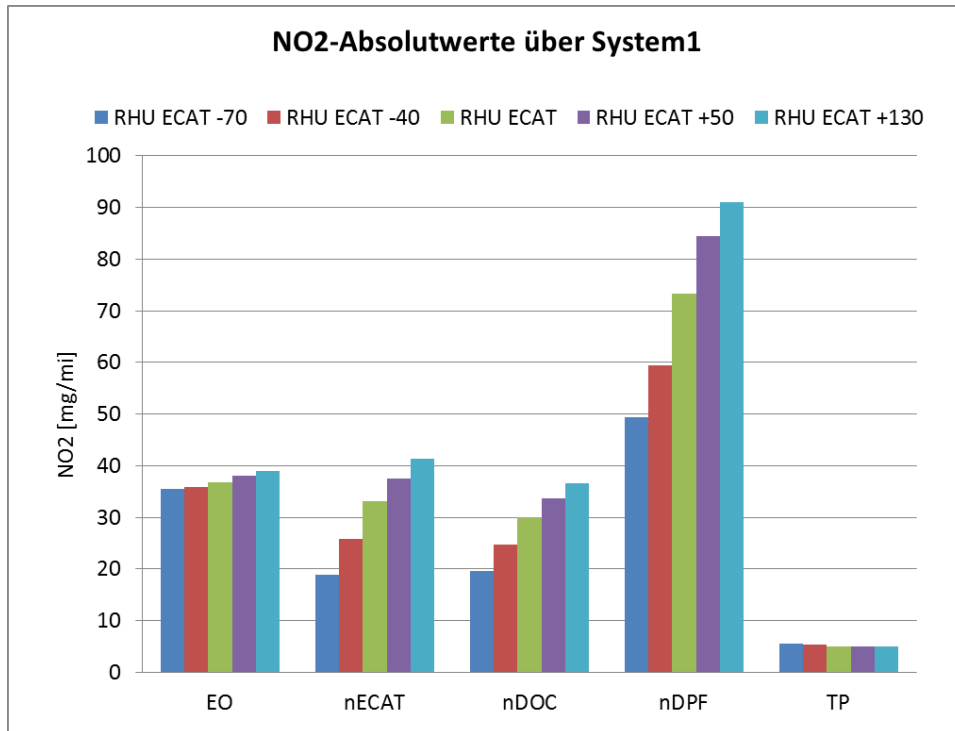


**Abb. 5-11;** *NMHC*-Emissionen EO/TP im Vergleich von "RHU und ECAT" zu "nur ECAT"

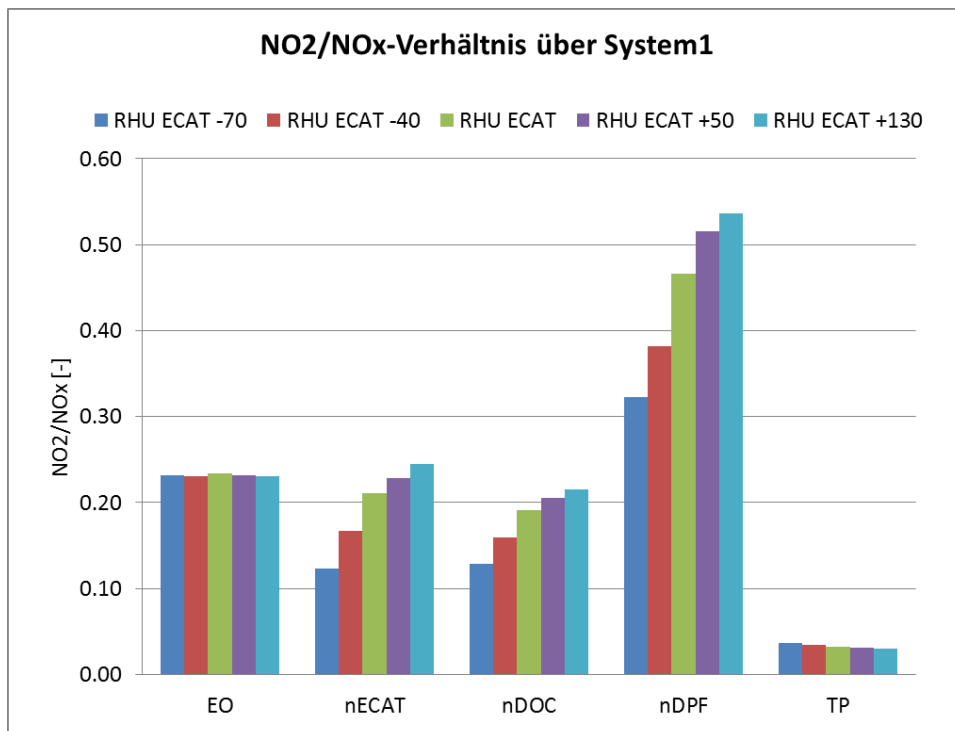
Aufbauend auf den Ergebnissen der „nur RHU“ Versuche wird diese Betriebsstrategie nicht weiter berücksichtigt, da es für die Anwendung nicht zielführend ist. Des Weiteren wird auch deutlich, dass der Einsatz des ECATs unbedingt notwendig ist damit so früh als möglich *NMHC* und *CO* umgesetzt werden können.

### ***NO*<sub>2</sub>-Emissionen über das EAS**

Neben der Temperatur und dem Vorhandensein von *NH*<sub>3</sub> ist die *NO*<sub>2</sub>-Konzentration bzw. das *NO*<sub>2</sub>/*NO*<sub>x</sub>-Verhältnis für das SCR-System von Bedeutung. Dafür werden in Abb. 5-12 die *NO*<sub>2</sub>-Absolutwerte über das EAS dargestellt, darin ist gut zu erkennen an welcher Stelle *NO*<sub>2</sub> gebildet oder reduziert wird. Ein *NO*<sub>2</sub>-Reduktion findet vorwiegend im ECAT und DOC statt. Je nachdem welches Temperatur- und *NMHC*-Niveau bei ECAT und DOC vorherrscht, verlagert sich der Schwerpunkt der *NO*<sub>2</sub>-Reduktion auf ECAT oder DOC. Der DPF ist hier vorwiegend für die *NO*<sub>2</sub>-Bildung verantwortlich, die für ein effektiv arbeitendes SCR-System ausschlaggebend ist. Zusätzlich sind in Abb. 5-13 die entsprechenden *NO*<sub>2</sub>/*NO*<sub>x</sub>-Verhältnisse dargestellt, mit der eine qualitative Aussage für das SCR-System getroffen werden kann.



**Abb. 5-12;** NO<sub>2</sub>-Emissionen im FTP75 über System1



**Abb. 5-13;** NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>-Verhältnis im FTP75 über System1

Zusammenfassend kann für die Ausgangsbasis gesagt werden, dass bereits durch den Einsatz des ECATs ein gutes Ergebnis erreicht werden kann. Weiters ist durch den Einsatz der RHU-Funktionen vorerst keine wesentliche Verbesserung möglich, mit verstärktem Einsatz verbessern sich jedoch die TP-NMHC- und -NO<sub>x</sub>-Emissionen, dafür muss der erhöhte Kraftstoffverbrauch, der durch den höheren Heizaufwand verursacht wird, gegengerechnet werden. Gemittelt aus der Kraftstoffverbrauchskurve

über die Temperatur (vor SCR-Katalysator) kann näherungsweise ein Mehrverbrauch von ca.11g/K100mi angegeben werden. Das bedeutet, dass für die Anhebung der mittleren Temperatur bei SCR-Eintritt um 1K zusätzlich 11g Diesel auf 100 Meilen notwendig sind. Um eine bessere *NMHC*- und *NO<sub>x</sub>*-Konvertierung erreichen zu können, ist es notwendig einen größeren DOC einzusetzen. Damit wird die Raumgeschwindigkeit (Spacevelocity) abgesenkt und die Konvertierung angehoben, zusätzlich wird auch eine verbesserte *NO<sub>2</sub>*-Bildung erwartet. Daher wurde im nächsten Schritt die Länge des DOCs von 4“ auf 6“ vergrößert, das entspricht eine Vergrößerung des Katalysator-Volumens von 1.7 auf 2.5 Liter.

### 5.2.2 System1, 6“DOC

Damit der DOC seine Hauptaufgaben (*CO*-/*NMHC*-Umsatz, Exotherme und *NO<sub>2</sub>*-Bildung) effizienter nachkommen kann, wurde das Katalysatorvolumen vergrößert. Durch die Vergrößerung des DOCs waren folgende Punkte zu erwarten:

- + höhere *NMHC*-Umsatz
- + bessere *NO<sub>2</sub>*-Bildung und damit höherer *NO<sub>x</sub>*-Umsatz
- schlechteres Aufwärmverhalten durch erhöhte thermische Masse

In Abb. 5-14 ist ein Vergleich zwischen dem 4“ und 6“DOC für die *NMHC*-Konvertierung im „Basis“-Versuch dargestellt, der einen verbesserten *NMHC*-Umsatz für den 6“DOC zeigt. Die Katalysatorgröße hat bei der *CO*- und *NMHC*-Konvertierung einen wesentlichen Einfluss.

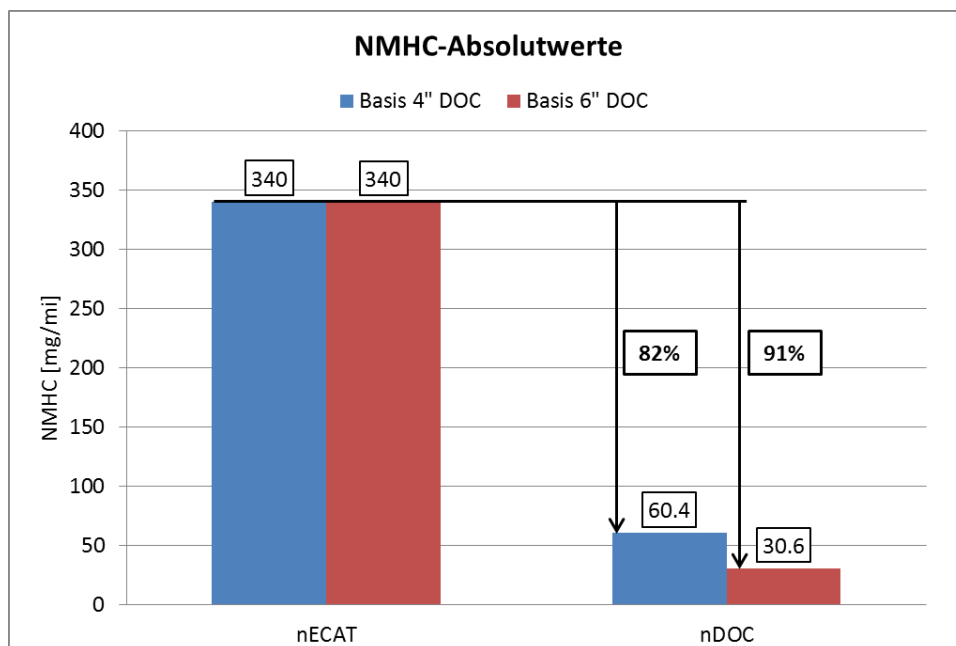


Abb. 5-14; *NMHC*-Konvertierung im FTP75 für 4" vs. 6"DOC

Wie in Abb. 5-15 zu sehen ist, steigt die *NO<sub>2</sub>*-Bildung im DOC nur gering an. Durch die Vergrößerung des DOC-Volumens kommt es, aufgrund der verwendeten Parametrierung, zu keiner signifikanten *NO<sub>2</sub>*-Bildung.

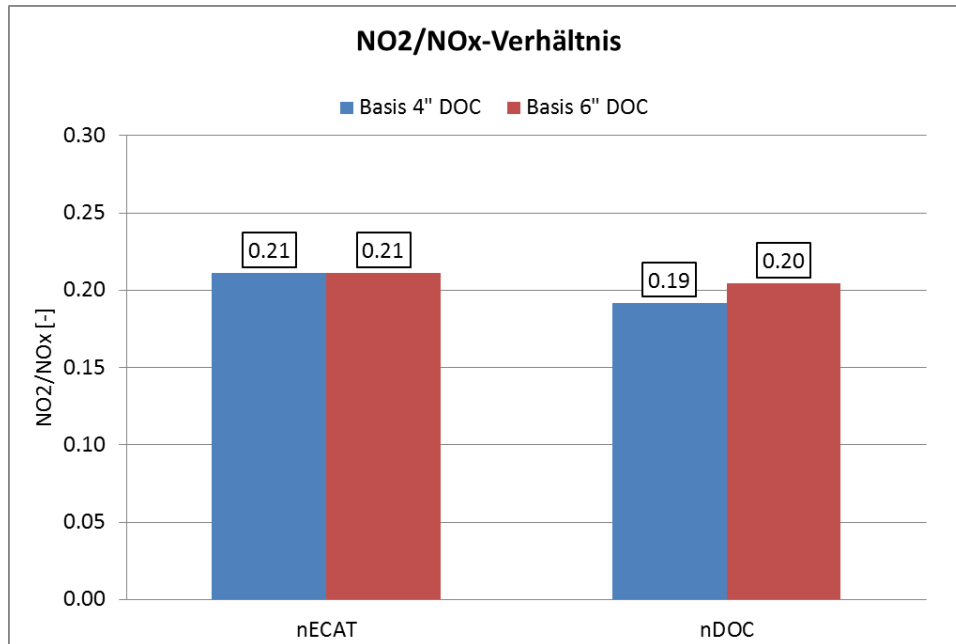


Abb. 5-15;  $NO_2/NO_x$ -Verhältnis im FTP75 für 4" vs. 6" DOC

Neben den Vorteilen der besseren *NMHC*-Konvertierung und gering höheren  $NO_2$ -Bildung weist der größere DOC einen Nachteil für das Aufwärmverhalten auf. Aufgrund der größeren thermischen Masse benötigt der 6" DOC mehr Zeit um aufgewärmt zu werden, dies wiederum hat Auswirkungen auf die nachfolgenden Abgasnachbehandlungskomponenten. Das langsamere Aufwärmen des größeren DOCs wirkt sich wesentlich auf das SCR-System aus. In Abb. 5-16 ist der Einfluss auf die Temperaturen vor und nach dem SCR-System dargestellt. Durch das geänderte Aufwärmen wird infolge dessen ein schlechterer  $NO_x$ -Umsatz verursacht (Abb. 5-17).

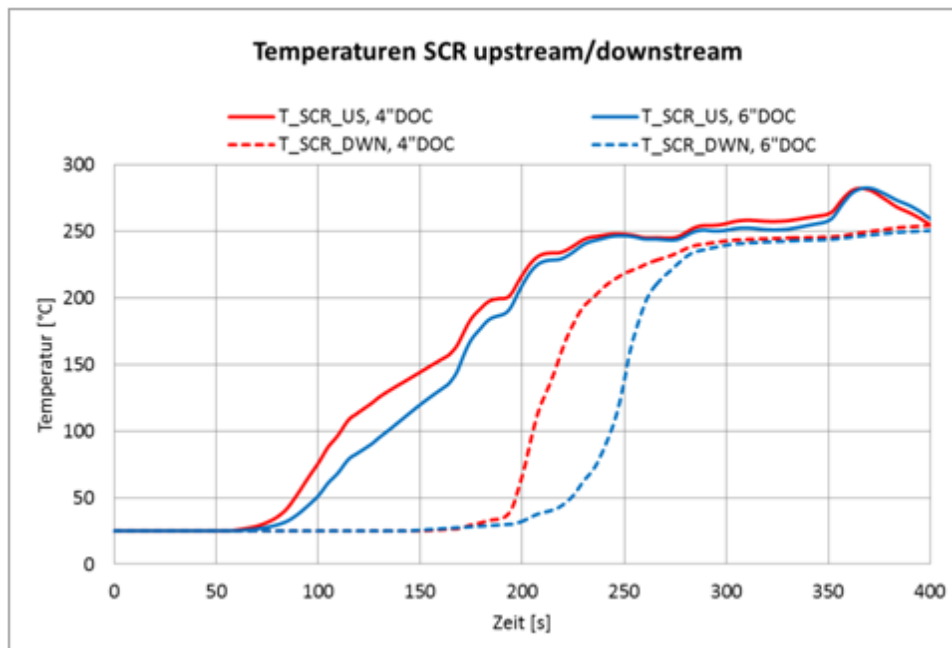


Abb. 5-16; Auswirkung der größeren thermischen Masse auf SCR-Temperaturen

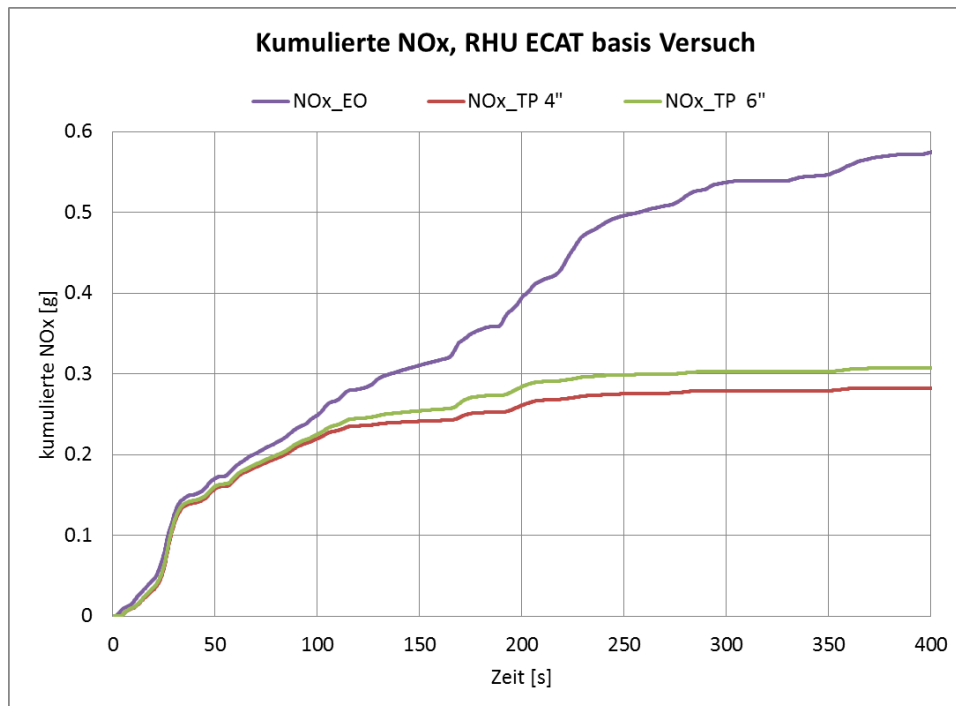


Abb. 5-17; Kumulierte EO- und TP- $NO_x$ -Emissionen 4"DOC vs. 6"DOC

Aufgrund des veränderten Aufwärmverhaltens durch den 6"DOC erreicht das SCR-System erst später Betriebstemperatur. Im nächsten Schritt wird ein besserer DOC in die Simulation eingesetzt. Dazu wurden beim 6"DOC die Kinetik-Parameter um 50% angehoben, das entspricht einer Erhöhung der Edelmetallbeschichtung.

### 5.2.3 System1, 6"DOC und 50% höhere Kinetik-Parameter

Um einen besseren DOC darzustellen, wurden die notwendigen Kinetik-Parameter um 50% erhöht, damit wird ein besser funktionierender DOCs abgebildet. Aus diesem Versuch war zu erwarten:

- + höhere *NMHC*-Umsatz
- + bessere *NO<sub>2</sub>*-Bildung und damit höherer *NO<sub>x</sub>*-Umsatz

Die Erhöhung der Edelmetallbeschichtung und die damit einhergehende Verbesserung der ablaufenden Oxidationsprozesse, sind in den Ergebnissen gut wiederzufinden. Abb. 5-18 zeigt den Vergleich zwischen 4"DOC, 6"DOC und 6"DOC+50%. Wie zu erwarten war, verbessert sich die *NMHC*-Konvertierung durch Vergrößerung und Erhöhung der Edelmetallanteile.

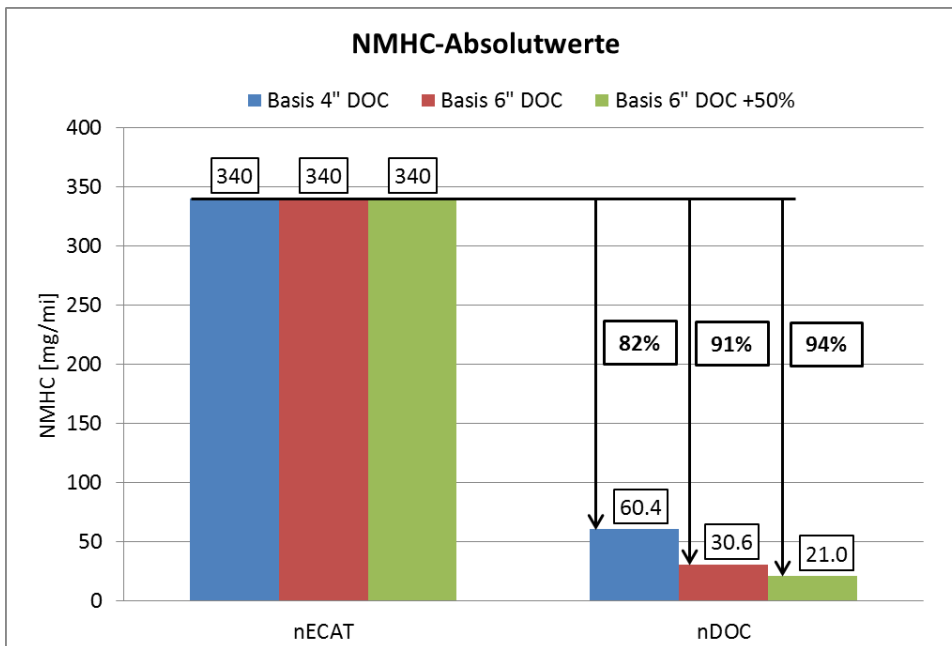


Abb. 5-18; NMHC-Konvertierung im FTP75, 4"DOC vs. 6" DOC vs. 6"DOC+50%

Ein ähnliches Bild ergeben die Resultate für die NO<sub>2</sub>-Bildung, dafür ist wieder der Vergleich zwischen 4"DOC, 6"DOC und 6"DOC+50% dargestellt (Abb. 5-19). Die NO<sub>2</sub>-Bildung wird durch den verbesserten 6"DOC verstärkt, dass wiederum kommt dem SCR-System zugute.

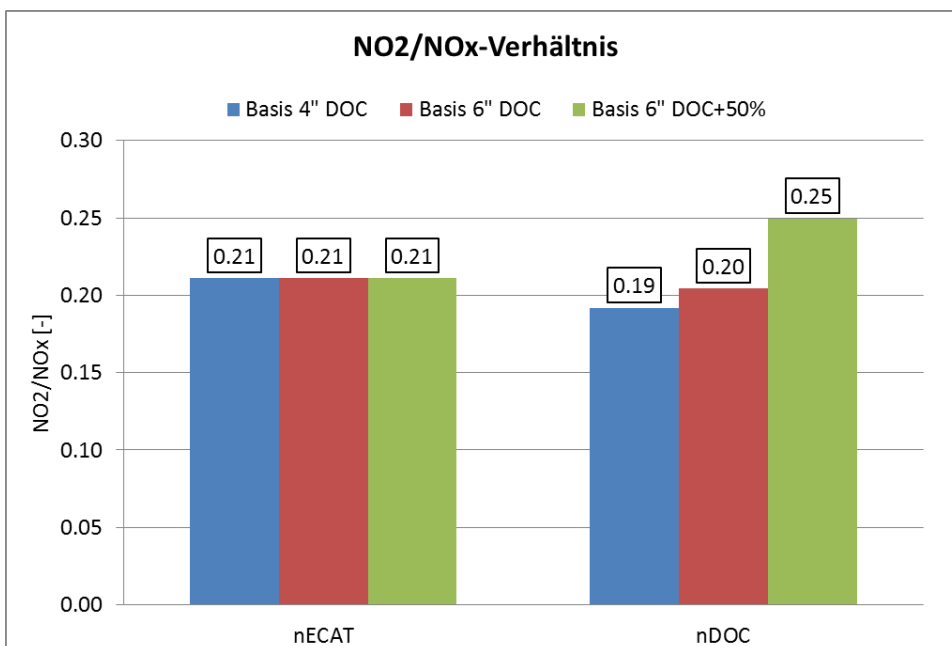
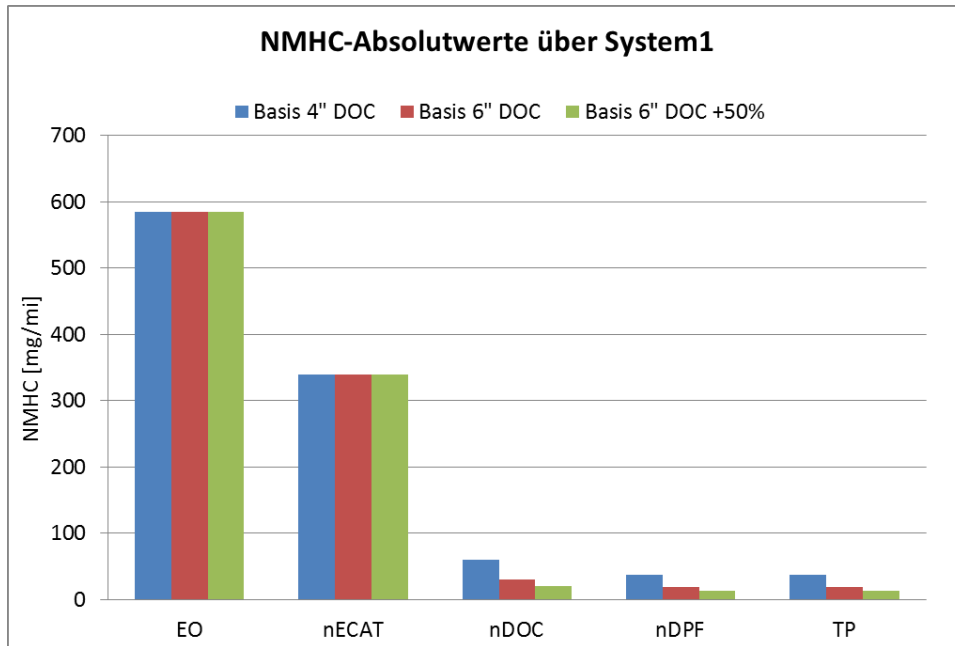


Abb. 5-19; NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>-Verhältnis im FTP75, 4" vs. 6"DOC vs. 6"DOC+50%

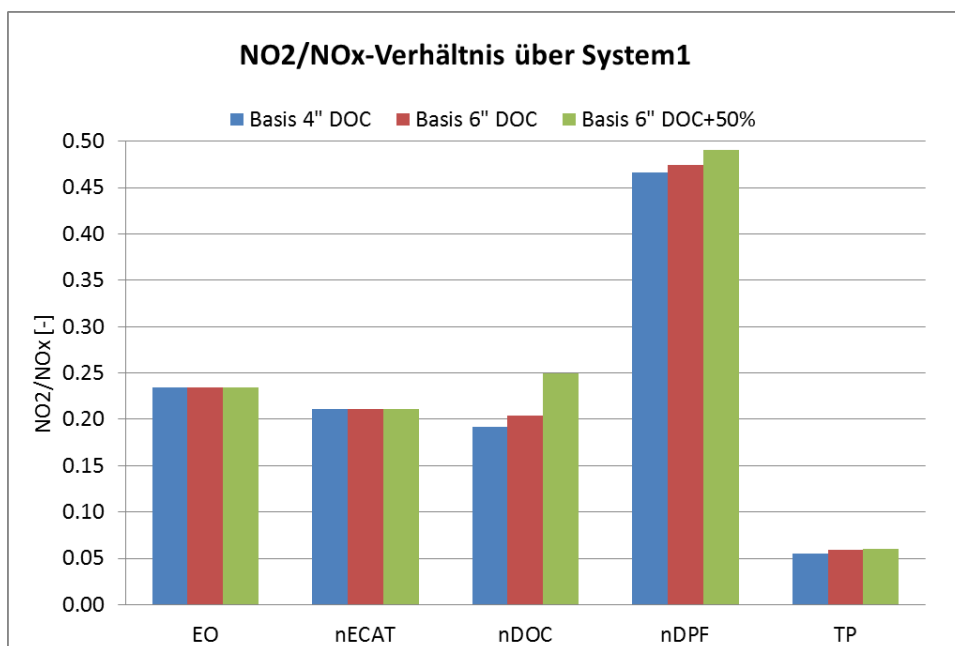
Die Ergebnisse der unterschiedlichen DOC-Parameter zeigen, dass die Wahl des DOCs einen wesentlichen Einfluss auf die Summenergebnisse des FTP75 hat. In den Abb. 5-20 und Abb. 5-21 sind hierfür die NMHC-Emissionen und das NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>-Verhältnis über das EAS abgebildet.





**Abb. 5-20;** NMHC-Emissionen im FTP75 über System1

Im  $NO_2/NO_x$ -Verhältnis ist ein weiterer Trend erkennbar. Der DPF bildet in Abhängigkeit des Eingangsverhältnisses von  $NO_2/NO_x$  nur einen gewissen Anteil an  $NO_2$ , somit wird mit verbesserten DOC die  $NO_2$ -Bildung vom DPF zum DOC verschoben.



**Abb. 5-21;**  $NO_2/NO_x$ -Verhältnis im FTP75 über System1

Aus den bisherigen Ergebnissen wird deutlich, dass eine entsprechende Betriebsstrategie immer zur eingesetzten Hardware passen muss. Der verstärkte Einsatz der RHU-Funktionen ist nur dann zielführend, wenn der DOC in der Lage ist die geforderten Konvertierungsraten zu erreichen. Als nächstes wurde eine Sensibilitätsstudie für das Konzept1 durchgeführt um weiteres Potential aufzuzeigen.

## 5.2.4 Sensibilitätsstudie (Gestaltung EAS, DPF und SCR)

In diesem Kapitel werden unterschiedliche Parameter des EAS variiert um deren Auswirkungen auf das System 1 zu zeigen. Für diese Studie wurden zwei Bereiche näher betrachtet. Der erste Bereich befasst sich mit den Rohrführungen und der zweite mit den beiden Komponenten DPF und SCR.

Gestaltung EAS:

- Rohrstück zwischen ECAT und DOC (Wärmeverluste)
- Trägermaterial DOC (Materialdaten)
- Verbindungsrohre zwischen DPF und SCR (Wärmeverluste und Wärmekapazität)

DPF und SCR:

- DPF-Volumen
- SCR um 50% erhöhte Kinetik-Parameter

Basierend auf dem Modellstand des 6<sup>o</sup>DOCs und 50% höhere Kinetik-Parameter wurde diese Sensibilitätsstudie durchgeführt.

### 5.2.4.1 Gestaltung EAS

Ziel dieses Abschnittes ist es, ein besseres Aufwärmverhalten und ein höheres Temperaturniveau für das EAS zu erhalten. Dafür wurden bestimmte Rohrführungen optimiert und das Trägermaterial des DOCs verändert.

#### Rohrstück ECAT und DOC

Basierend auf den Stoffwerten und Abmessungen des Rohrmodells wurde der Wärmeverlust in den Grenzen von Faktor 0 bis 2 verändert. Faktor 0 entspricht einer perfekten Isolierung, kein Wärmeverlust an die Umgebung. Wodurch wiederum der Faktor 2 den Wärmeverlust an die Umgebung verdoppelt.

#### Trägermaterial DOC

Das verwendete Trägermaterial hat einen großen Einfluss auf das Aufwärmverhalten eines Bauteils. Grundlegend werden zwei unterschiedliche Materialien verwendet, entweder auf keramischer oder metallischer Basis. Der bis jetzt verwendete DOC besitzt Cordierit als Trägermaterial, daher wurde das Trägermaterial (Materialdaten + Wandstärke) von Cordierit auf Metall geändert.

#### Verbindungsrohre zwischen DPF und SCR

Wie bereits bei *Rohrstück ECAT und DOC* wurde zusätzlich zum Wärmeverlust auch die Wärmekapazität des Rohres variiert. Der Wärmeverlust wurde wieder zwischen Faktor 0 und 2 verändert. Die Wärmekapazität des Rohres spiegelt das Potential der Wärmespeicherung wieder, daher sollten die Wärmekapazitäten möglichst gering sein um ein rasches Aufwärmen des Systems erzielen zu können. Hierfür wurde die Wärmekapazität im Bereich von Faktor 0 bis 2 verändert. Faktor 0 entspricht keiner Wärmekapazität und 2 entspricht einer Verdoppelung.

Nach Abschluss dieser Sensibilitätsstudie wurde aus den Ergebnissen der Parametervariation ein Optimum gewählt. Es wurde darauf geachtet, dass die gewählten Parameter in einem realistischen Bereich liegen. Die Wärmeverluste des Rohrs zwischen ECAT und DOC wurden auf  $\frac{3}{4}$  reduziert. Außerdem wurde das Trägermaterial vom DOC von Cordierit auf Metall geändert und die Wärmeverluste des Verbindungsrohres DPF-SCR halbiert und die Wärmekapazität auf  $\frac{1}{4}$  reduziert.

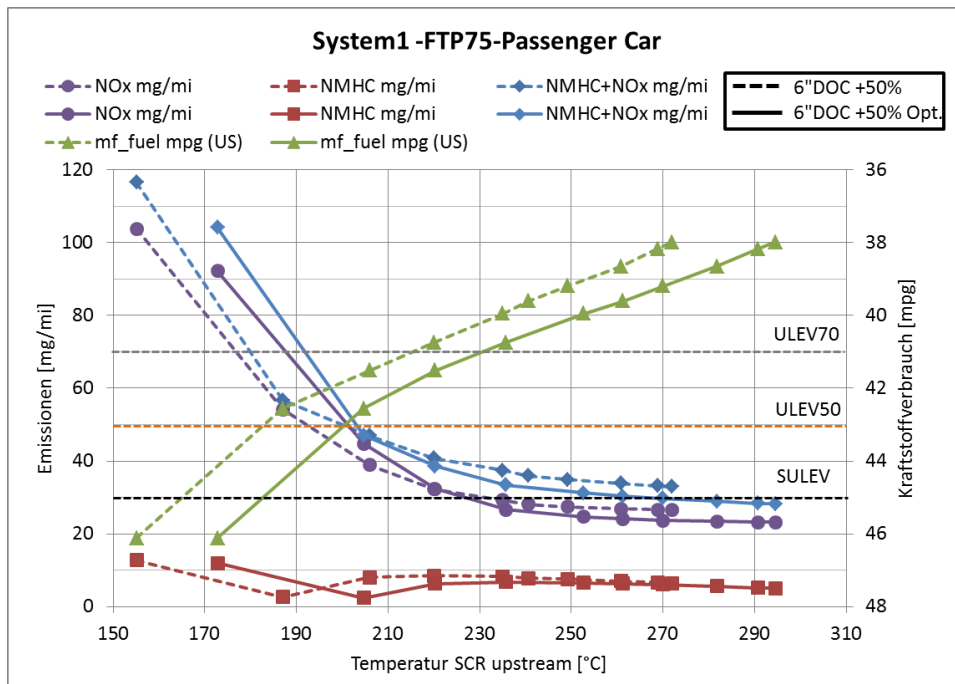
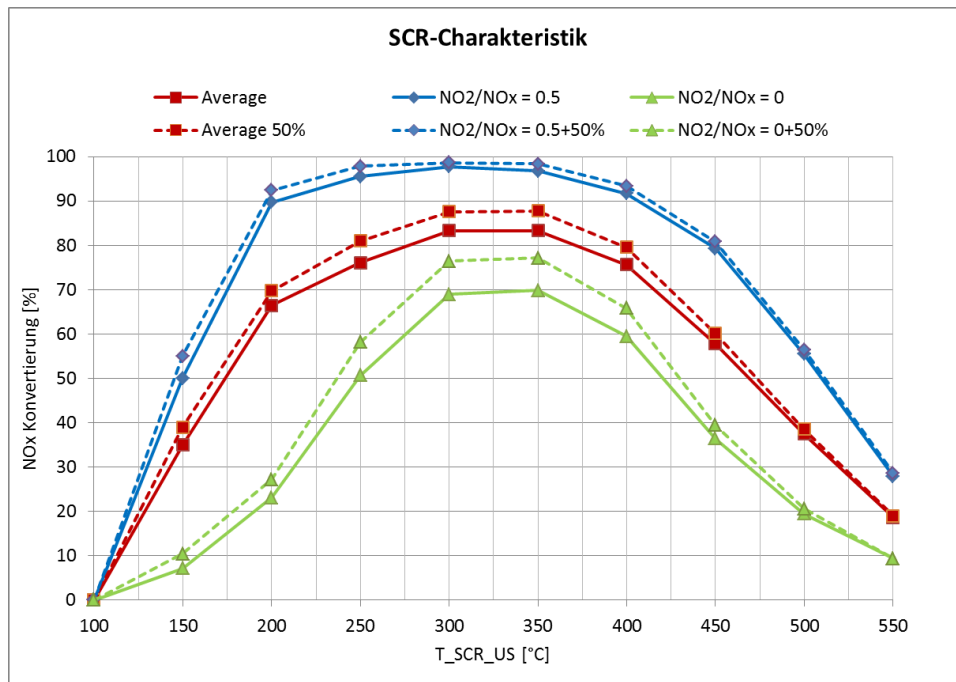


Abb. 5-22; Zyklusergebnisse System1 für FTP75 mit 6\"/>

In Abb. 5-22 sind Zyklusergebnisse für den FTP75 dargestellt. Die gestrichelte Linie entspricht dem Ergebnis mit dem 6\"/>

#### 5.2.4.2 DPF und SCR

Als letztes wurden die beiden Komponenten DPF und SCR verändert. Der DPF besitzt in der vorliegenden Konfiguration ein Volumen von etwa 3.3 Liter. Durch die geometrischen Abmessungen weist der DPF eine große thermische Masse auf, welche das Aufwärmverhalten des SCR-System beeinflusst, daher wurde die Länge des DPFs von 8\"/>



**Abb. 5-23;**  $NO_x$ -Konvertierung SCR und SCR+50% für unterschiedliche  $NO_2/NO_x$ -Verhältnisse

Durch die Reduktion des DPF-Volumens von 3.3 Liter auf 2.5 Liter wird die  $NO_2$ -Bildung verändert, jedoch ist das in den Ergebnissen kaum zu erkennen. Bezogen auf die  $NO_2$ -Bildung wäre der 6<sup>er</sup> DPF für das System1 ausreichend groß dimensioniert.

### 5.2.5 Zusammenfassung System1

Um mit System1 geringste TP-Emissionen erreichen zu können, ist eine Systemoptimierung notwendig, zusätzlich müssen die RHU-Funktionen eingesetzt werden um das Aufwärm- und Warmhalteverhalten zu verbessern, dass ist für das SCR-System und damit für einen hohen  $NO_x$ -Umsatz ausschlaggebend.

Aus den Ergebnissen mit der Ausgangsbasis (4<sup>er</sup> DOC) konnten einige Potentiale dieser Konfiguration gezeigt werden. Bereits die Ergebnisse für den „nur ECAT“-Versuch waren in einem akzeptablen Bereich. Die erhöhten TP-NMHC-Emissionen aus den „RHU ECAT“-Versuchen resultierten aus einem zu klein dimensionierten DOC. Nachdem die Größe und der Edelmetallanteil des DOCs angepasst wurden, konnten auch mit RHU-Funktionen gute Resultate erzielt werden, damit wurde das Potential für die NMHC-Konvertierung gezeigt. Anschließend wurde das System hinsichtlich des  $NO_x$ -Umsatzes betrachtet, daher wurden Wärmeverluste und Wärmekapazitäten bestimmter Rohrelemente variiert und danach wurde das DPF-Volumen reduziert und ein verbesserter SCR-Katalysator eingesetzt.

Abschließend zeigt Abb. 5-24 das finale Ergebnis aus der Systemoptimierung. Nur durch den Einsatz des ECATs können Zielwerte für ULEV50 erreicht werden. Das Ziel für SULEV kann durch den Einsatz der RHU-Funktionen erreicht werden, auf Kosten eines geringen Mehrverbrauchs.

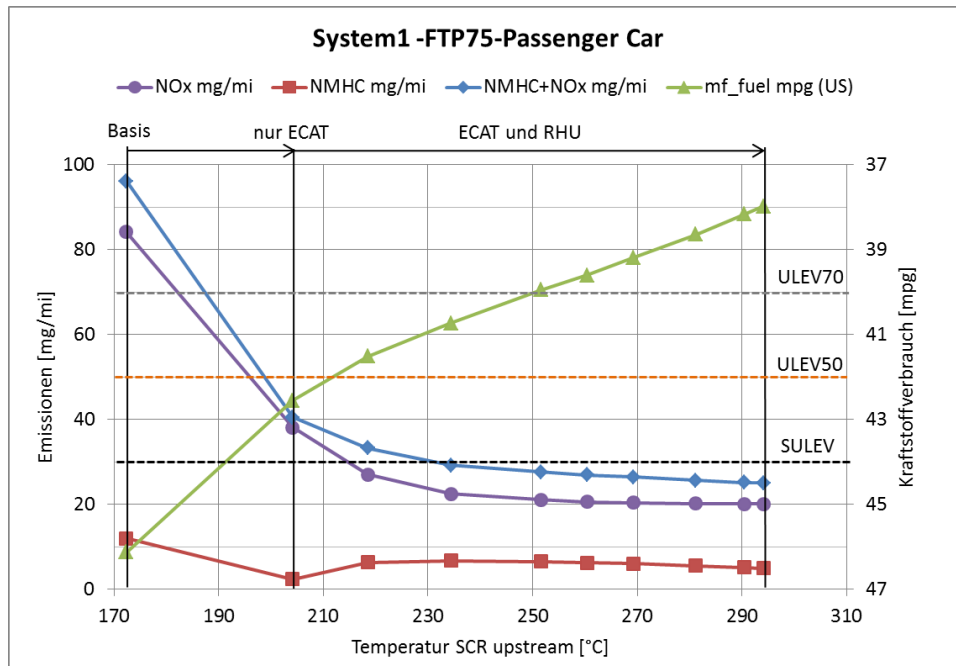


Abb. 5-24; Zyklusergebnisse System1 für FTP75 mit 6"DOC+50%, optimiert, 6"DFP und SCR+50%

### 5.3 Abgasnachbehandlungssystem2

Mit dem System2 wird ein alternatives Konzept gezeigt. Der Aufbau unterscheidet sich zum System1 durch den Einsatz eines sDPFs (SCR-Beschichtung auf DPF), zusätzlich wird die Harnstoffdosiereinheit vor sDPF positioniert. Die Abb. 5-25 zeigt den prinzipiellen Aufbau des zweiten Konzepts, bestehend aus ECAT745, DOC730, sDPF722 und SCRI736, wiederum bestünde die Möglichkeit einen Slip-CAT einzusetzen. Wie in der Darstellung erkennbar ist, befindet sich der SCRI an letzter Stelle im Abgasstrang und somit an einer thermisch ungünstigen Position. Daher soll im Laufe der Untersuchung dargestellt werden, ob es notwendig ist diesen SCRI einzusetzen.

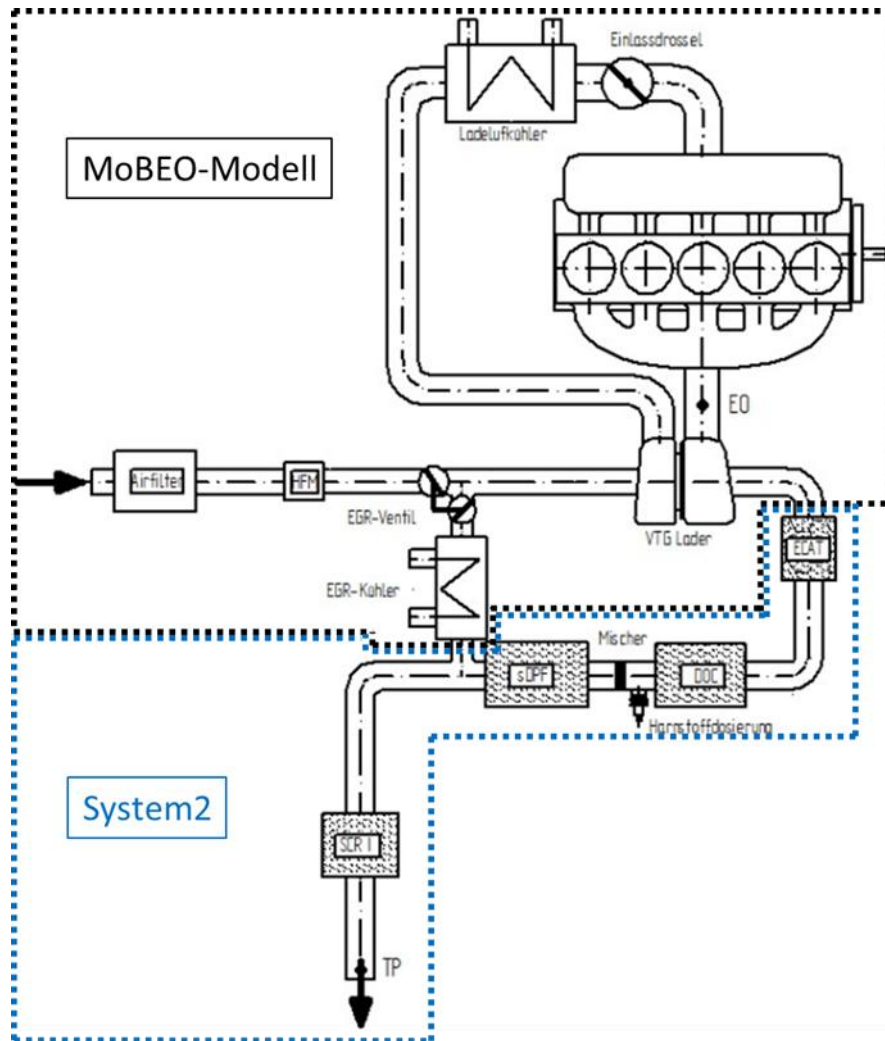


Abb. 5-25; Prinzipdarstellung Abgasnachbehandlungssystem2

Tab. 5-2 gibt einen Überblick über die für System2 durchgeführten Variationsrechnungen. Priorisiert wurde bei den Untersuchungen der DOC und die RHU-Funktionen, die maßgeblich für die erreichten Emissionswerte verantwortlich sind.

Bezeichnung	Beschreibung
Ausgangsbasis 4"DOC	Basis-Konfiguration des System1
6"DOC 6"DOC+50%	4" wurde durch 6"DOC ersetzt Reaktionskinetik des 6"DOCs um 50% angehoben
6"DOC+50%, RHU Parametervariation	Anpassung der RHU-Funktionen, hauptsächlich Menge für späte Nacheinspritzung und Temperaturschwellen

Tab. 5-2; Durchgeführte Variationsrechnungen für System2

Aus dem Aufbau ergibt sich bereits ein wesentlicher Vorteil gegenüber System1, der im höheren Temperaturniveau bei sDPF-Eintritt liegt und zusätzlich wird früher im Zyklus eine ausreichend hohe Temperatur für das SCR-Systems erreicht. Damit ergibt sich für das System2 ein gutes Potential für den  $NO_x$ -Umsatz. Für den sDPF wird eine ähnlich gute Gleichverteilung wie für den SCR in System1 angenommen, jedoch kann diese Annahme in Realität nur mit erhöhtem Aufwand nachgekommen werden, da für eine gute Gleichverteilung ein entsprechender Mischungsweg erforderlich ist.

### 5.3.1 System2, Ausgangsbasis 4"DOC

Für die Konzeptuntersuchung wurde nach der in Kapitel 5.1 ausgeführten Vorgehensweise durchgeführt. Gestartet wurde wie bei System1 mit der 4"DOC. Mit System2 wurden für alle Variationsrechnung (aus Tab. 5-2) folgende Simulationen gerechnet:

- Basis ohne RHU und ohne ECAT
- Nur ECAT
- RHU und ECAT (Variation der Temperaturschwellen für EOM2)

In diesem Abschnitt wird auf die Rechnungen „nur RHU“ verzichtet, da diese Strategie bereits für Konzept1 nicht zielführend war.

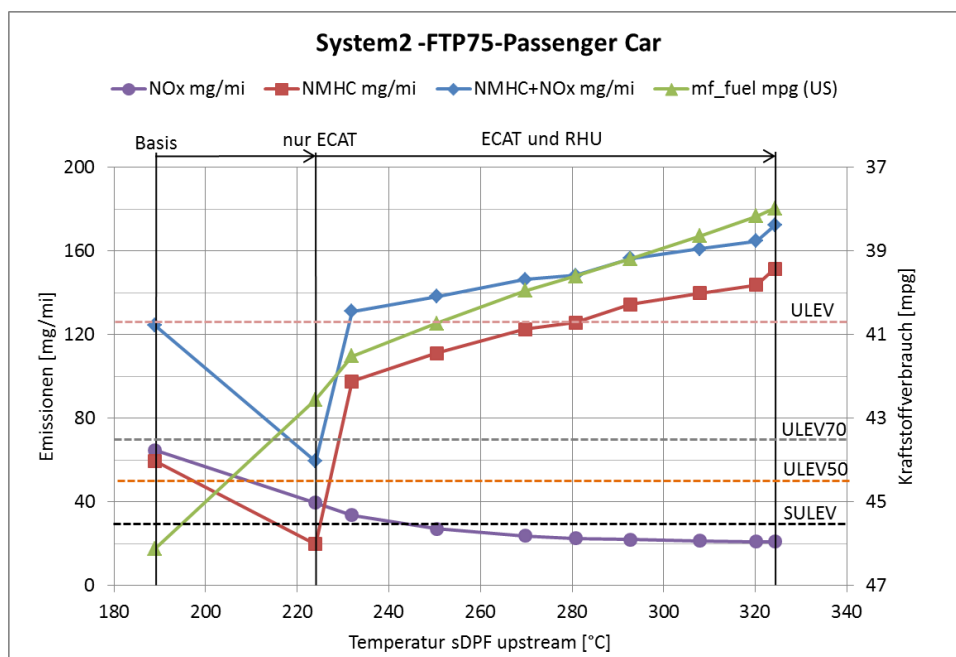


Abb. 5-26; Zyklusergebnisse System2 für FTP75 mit 4"DOC

In Abb. 5-26 sind für die Ausgangsbasis die Zyklusergebnisse für *NMHC*, *NO<sub>x</sub>* und *NMHC+NO<sub>x</sub>* für den FTP75 dargestellt. Es fällt auf, dass die Versuche mit RHU erhöhte TP-*NMHC*-Emissionen aufweisen. Ursache dafür ist die fehlende katalytische Wirkung des sDPFs, der dadurch keine *NMHC* und *CO* umsetzen kann. Wie zu erwarten war, wird eine höhere *NO<sub>x</sub>*-Konvertierung durch den Einsatz des sDPFs erreicht. Der „nur ECAT“-Versuch erreicht bereits ohne zusätzlichen Aufwand die Grenzwerte für ULEV70. Mit dem Einsatz der RHU-Funktionen verbessert sich zwar der *NO<sub>x</sub>*-Umsatz, jedoch steigen die TP-*NMHC*-Emissionen deutlich an und bewirken somit deutlich höhere *NMHC+NO<sub>x</sub>*-Emissionen.

Die Abb. 5-27 zeigt die *NMHC*-Verteilungen über das System1 und System2 für den „Basis“-Versuch, daraus ist die Auswirkung der fehlenden katalytischen Wirkung des sDPFs erkennbar (sDPF enthält kein Edelmetall, da das Reduktionsmittel *NH<sub>3</sub>* ansonsten oxidieren würde). Der Unterschied zwischen den beiden Konzepten beträgt bereits im Basisversuch rund 50% bezogen auf System1. Durch den Einsatz der RHU-Funktionen und den damit verbundenen hohen EO-*NMHC*-Emissionen werden die TP-*NMHC*-Emissionen deutlich höher, was auch in den Ergebnissen der Abb. 5-26 erkennbar ist. Aufgrund dieser Tatsache sind an den DOC hohe Anforderungen an die *NMHC*-Konvertierung gestellt.

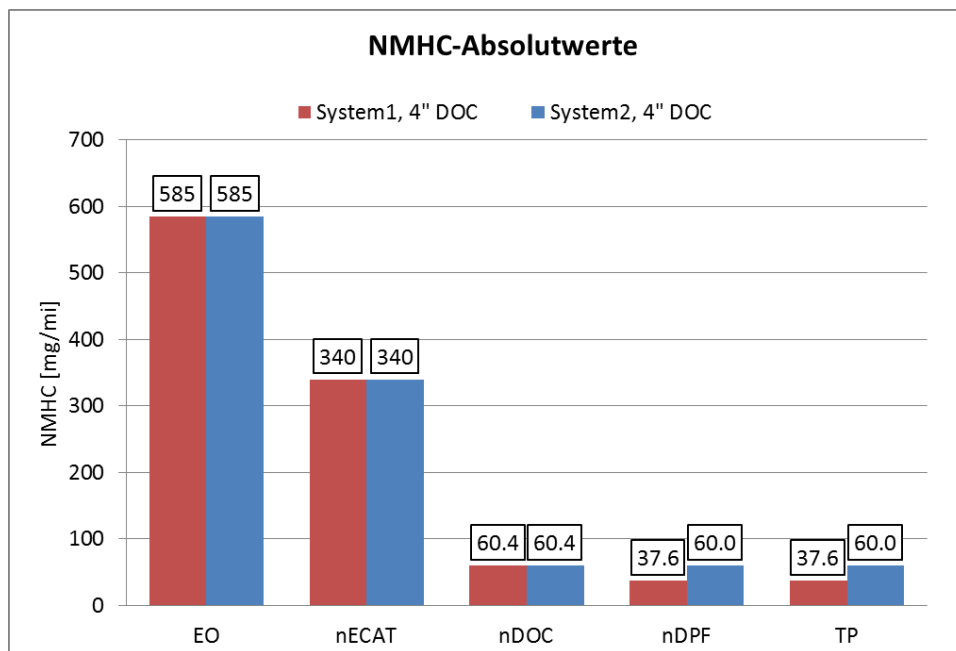


Abb. 5-27; *NMHC*-Verteilung im FTP75 über System1 und System2

Die Abb. 5-28 zeigt den *NO<sub>x</sub>*-Umsatz über das SCR-System, welches den sDPF und den SCR-I umfasst. In der Abbildung sind die kumulierten *NO<sub>x</sub>*-Emissionen für EO und TP über die mittlere sDPF-Eintrittstemperatur aufgetragen. Über der Temperatur von 280°C bietet das SCR-System keine signifikanten Vorteile, daher ist die Anhebung der sDPF-Eintrittstemperatur über 280°C nicht zielführend.



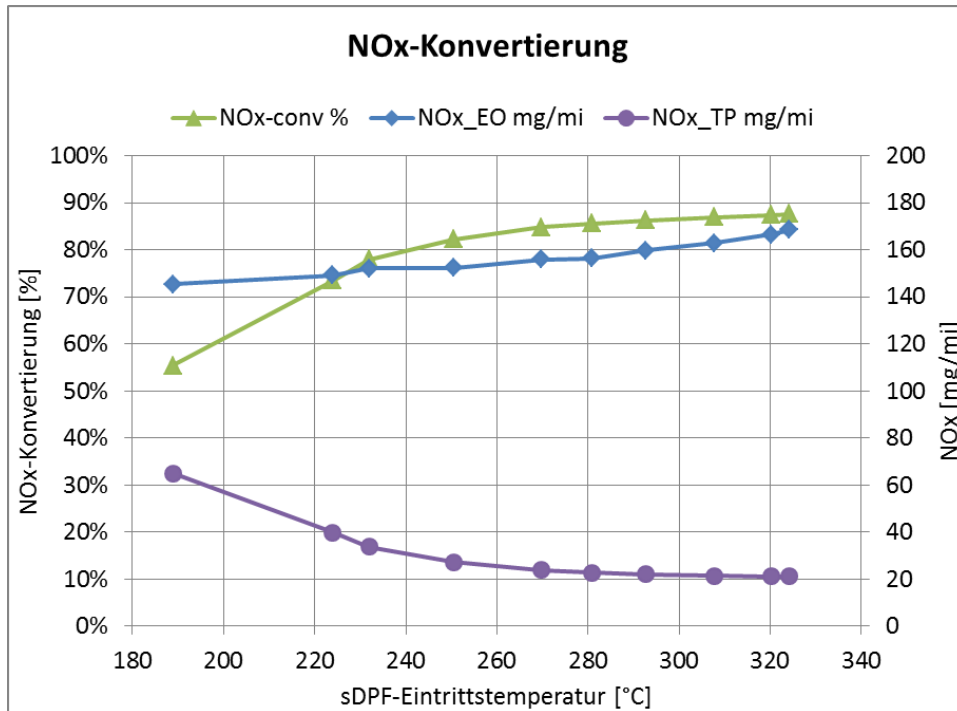


Abb. 5-28; NOx-Konvertierung im FTP75 System2 mit 4"DOC

Die Abb. 5-29 zeigt den NOx-Umsatz für die verschiedenen Versuche (Basis/nur ECAT/RHU ECAT-40/RHU ECAT und RHU ECAT+80). Im „Basis“-Versuch wird eine mittlere Eintrittstemperatur in den sDPF von ca. 189°C erreicht, damit wird bereits ein guter NOx-Umsatz (57%) am sDPF erzielt. Aufgrund der Wärmeverluste und des NH3-Mangels kann der SCRI keine NOx konvertieren und kann daher für den „Basis“-Versuch weggelassen werden.

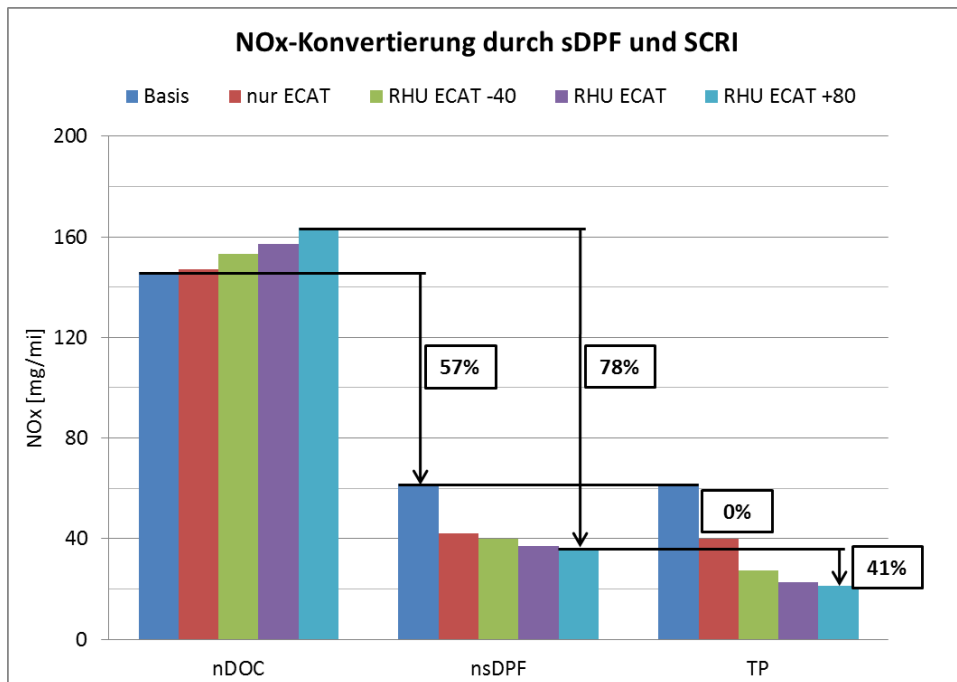
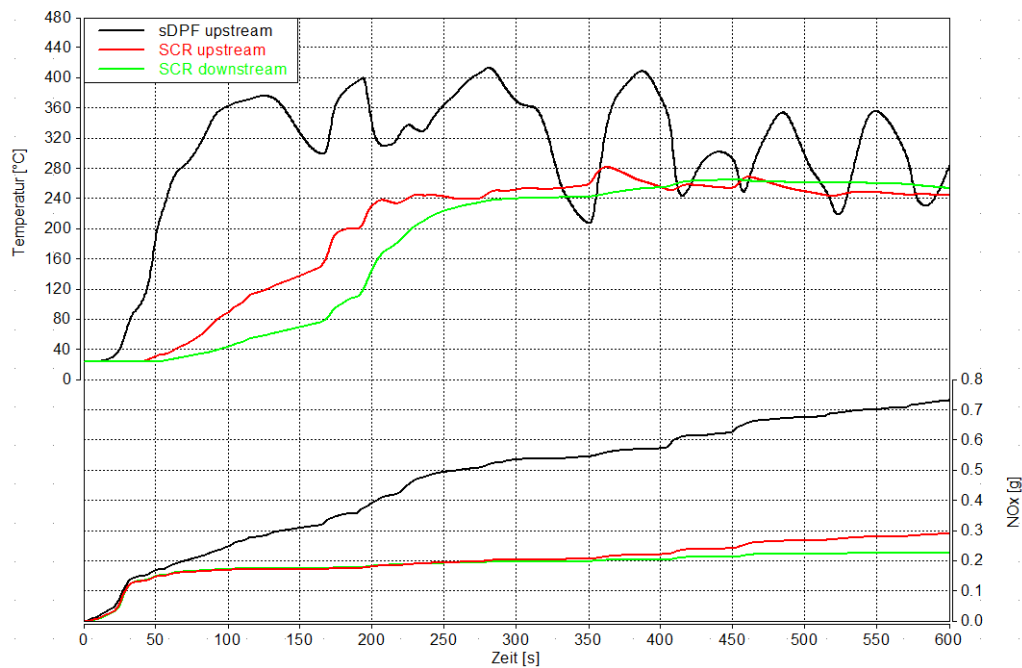


Abb. 5-29; NOx-Konvertierung im FTP75 durch sDPF und SCR in unterschiedlichen Versuchen

Eine Anhebung der sDPF-Eintrittstemperatur bewirkt neben einer besseren  $NO_x$ -Konvertierung des sDPFs auch einen  $NO_x$ -Umsatz durch den SCR1, der für den „RHU ECAT +80“-Versuch für den sDPF bei 78% und für den SCR1 bei weiteren 41% liegt.

- Basis, 189°C
- Nur ECAT, 224°C
- RHU ECAT, -40 250°C
- RHU ECAT, 281°C
- RHU ECAT +80, 320°C

Die Wirkungsweise des SCR-Systems (sDPF+SCR1) wird in Abb. 5-30 gezeigt, verwendet wurde der „RHU ECAT“-Versuch. Schwarz dargestellt sind die Größen bei sDPF-Eintritt, rot entspricht den Eingangsgrößen des SCR1 und grün kennzeichnet die Ausgangsgrößen des SCR1. Aus der Darstellung ist gut zu erkennen, dass der sDPF nach etwa 50 Sekunden beginnt  $NO_x$  umzusetzen. Der SCR1 hingegen beginnt erst nach ca. 400 Sekunden mit der Konvertierung, da erst zu diesem Zeitpunkt die Bedingungen für einen  $NO_x$ -Umsatz vorliegen.



**Abb. 5-30;**  $NO_x$ -Umsatz in den ersten 600 Sekunden des FTP75 für den „RHU ECAT“-Versuch

Das Potential des SCR1 ist für Konzept2 generell nicht so groß, da das vorliegende  $NO_2/NO_x$ -Verhältnis, das in Abb. 5-31 gezeigt wird, für den FTP75 zu gering ist. Durch den sDPF wird bereits ein großer Anteil des  $NO_2$  in den SCR-Reaktionen verbraucht. Da nicht jede SCR-Beschichtung in der Lage ist  $NO_2$  zu bilden, steht für den nachfolgenden SCR1 nur mehr ein geringes  $NO_2/NO_x$ -Verhältnis zur Verfügung.

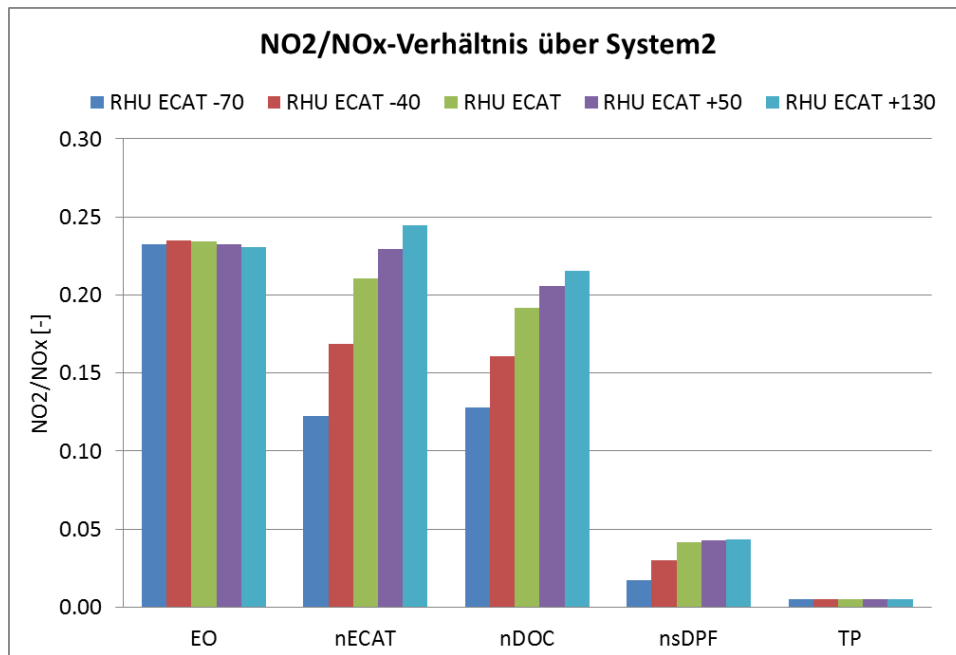


Abb. 5-31;  $NO_2/NO_x$ -Verhältnis im FTP75 über System2 für Ausgangsbasis

Um den höheren Anforderungen an den DOC gerecht zu werden, wurde der 4“DOC auf 6“ vergrößert, das entspricht einer Anhebung des Katalysatorvolumens von 1.7 auf 2.5 Liter. Aufgrund der erhöhten Anforderungen an die *NMHC*-Umsetzung wird zusätzlich die Edelmetallbeschichtung durch die Parametrierung angehoben.

### 5.3.2 System2, 6“DOC und mit 50% höhere Kinetik-Parameter

Da für das System2 ein 4“DOC die Anforderungen an die *NMHC*-Konvertierung nicht erfüllt, wurde der DOC auf 6“ vergrößert und im nächsten Schritt wurden die Kinetik-Parameter um 50% angehoben. Mit dem größeren DOC ist eine wirksame Absenkung der *NMHC*-Emissionen möglich. Durch die Hardwareanpassung wurde folgendes erwartet:

- + höhere *NMHC*-Umsatz
- + bessere  $NO_2$ -Bildung und damit höhere  $NO_x$ -Umsatz
- schlechteres Aufwärmverhalten durch erhöhte thermische Masse

Die Hardwarevariation des DOC bewirkt eine deutliche Verbesserung der *NMHC*-Konvertierung. Ein Vergleich zwischen 4“DOC, 6“DOC und 6“DOC+50% für den „RHU ECAT“-Versuch ist in Abb. 5-32 dargestellt. Die TP-*NMHC*-Emissionen im FTP75 können durch den 6“DOC mit 50% höheren Kinetik-Parameter im Vergleich zum 4“DOC um bis zu 70% abgesenkt werden, damit sind die TP-*NMHC*-Emissionen von 37mg/mi noch immer zu hoch, da diese generell unter den  $NO_x$ -Emissionen (22.8mg/mi) liegen sollten (Abb. 5-35).

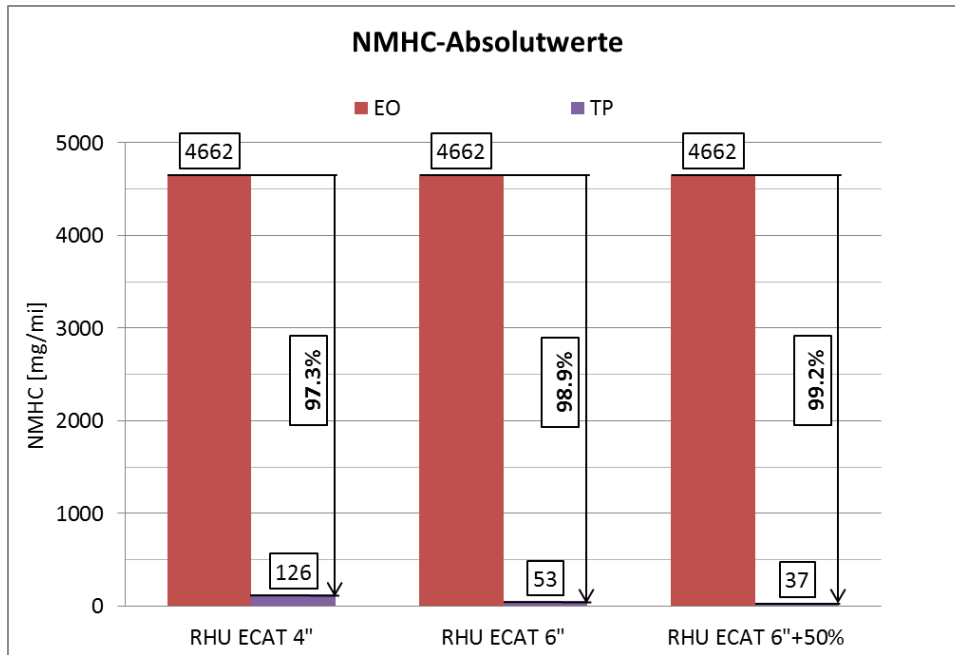


Abb. 5-32; NMHC-Konvertierung in „RHU ECAT“-Versuch für 4"DOC/6"DOC/6"DOC+50%

Um die TP-NMHC-Emissionen weiter absenken zu können, müssen andere Maßnahmen getroffen werden. Dafür wurden in Abb. 5-33 die kumulierten EO- und TP-NMHC-Emissionen in den ersten 600 Sekunden des FTP75 abgebildet. Zusätzlich dazu wurden Bereiche markiert, in denen die NMHC-Konvertierung des System2 Schwächen aufweist. Auffällig dabei ist, dass bei höheren Massendurchsätzen die NMHC-Umsetzung schlechter wird. Die Ursache dieses Phänomens ist auf eine zu hohe Raumgeschwindigkeit und zu geringe Temperatur im DOC zurückzuführen.

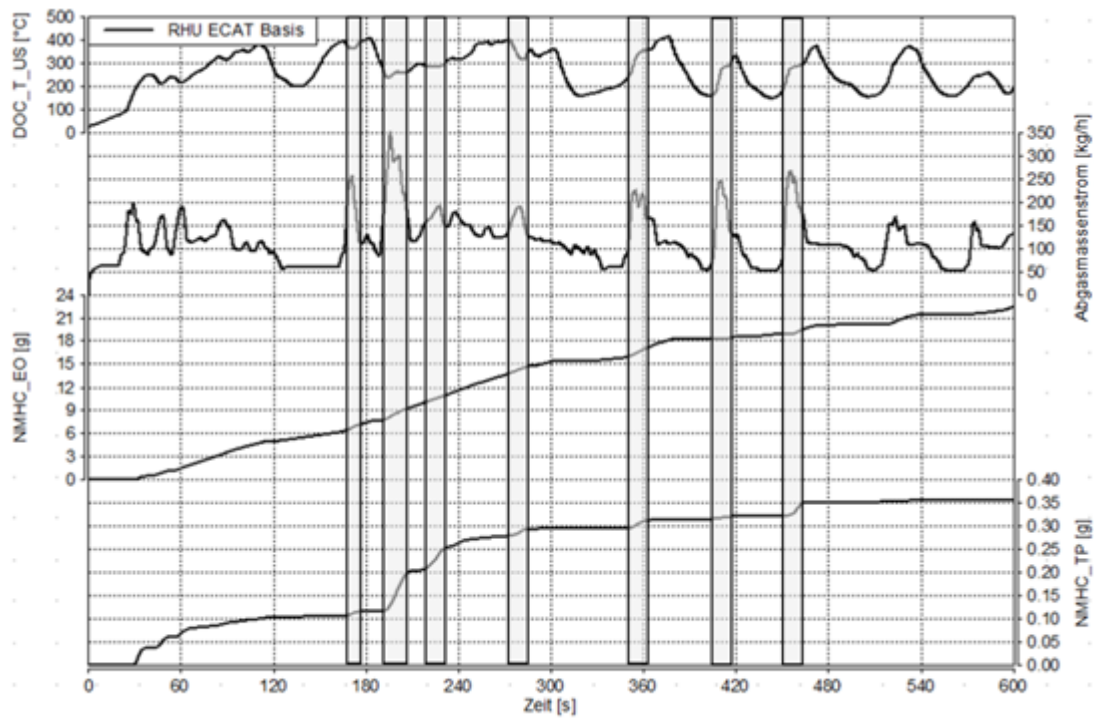


Abb. 5-33; kumuliert EO/TP-NMHC-Emissionen für „RHU ECAT Basis“-Versuch

Nachdem bis jetzt nur der Einfluss auf den *NMHC*-Umsatz gezeigt wurde, wird im Folgenden die *NO<sub>x</sub>*-Konvertierung näher betrachtet, dafür werden in Abb. 5-34 die ersten 1200 Sekunden des FTP75 gezeigt, darin sind die kumulierten *NO<sub>x</sub>*-Emissionen EO, nach sDPF und TP abgebildet, zusätzlich sind zwei Bereiche markiert. Der Bereich1 ist hauptverantwortlich für die TP-*NO<sub>x</sub>*-Emissionen, da in dieser Zeit weder sDPF noch SCRI die *NO<sub>x</sub>* umsetzen können. In Bereich2 wird ein großer Anteil der *NO<sub>x</sub>*-Emissionen durch den sDPF konvertiert. Nach etwa, 400 Sekunden erreicht der SCRI-Katalysator die Betriebsbedingungen und kann an der *NO<sub>x</sub>*-Umsetzung aktiv teilnehmen. Aus dieser Abbildung wird klar, dass eine Verbesserung der TP-*NO<sub>x</sub>*-Emissionen vorwiegend im Bereich1 durch diverse Maßnahmen erzielt werden kann.

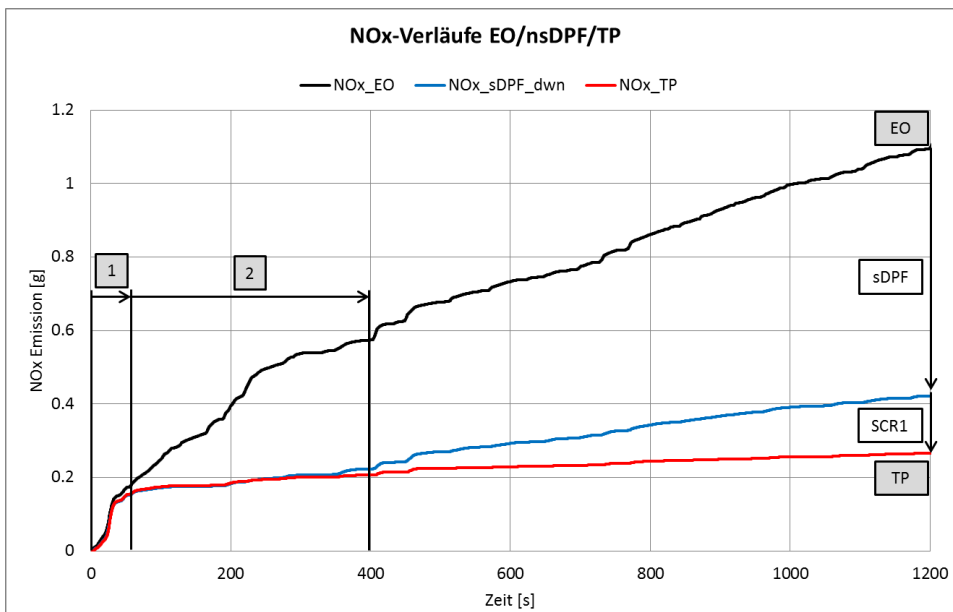


Abb. 5-34; *NO<sub>x</sub>*-Verlauf für "RHU ECAT"-Versuch mit 6"DOC

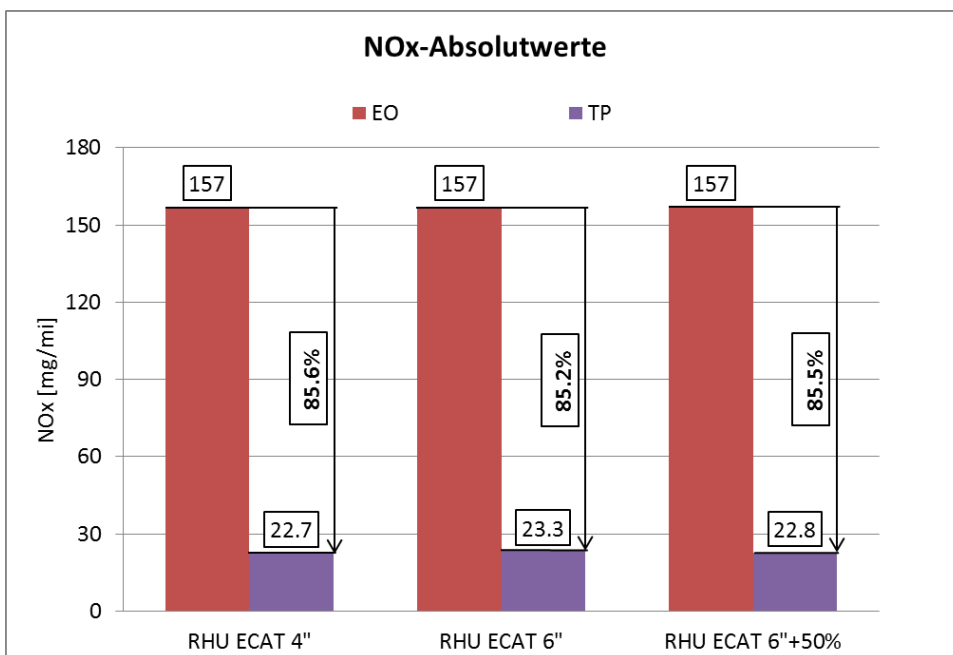


Abb. 5-35; *NO<sub>x</sub>*-Konvertierung in „RHU ECAT“-Versuch für 4"DOC vs. 6"DOC vs. 6"DOC+50%

In Abb. 5-35 sind die erreichten  $NO_x$ -Umsätze für den 4"DOC, 6"DOC und 6"DOC+50% dargestellt, darin ist gut zu erkennen, dass zwischen dem 4"DOC und 6"DOC die  $NO_x$ -Konvertierung abnimmt. Grund dafür ist das beeinflusste Warmlaufverhalten durch den größeren DOC (Abb. 5-36).

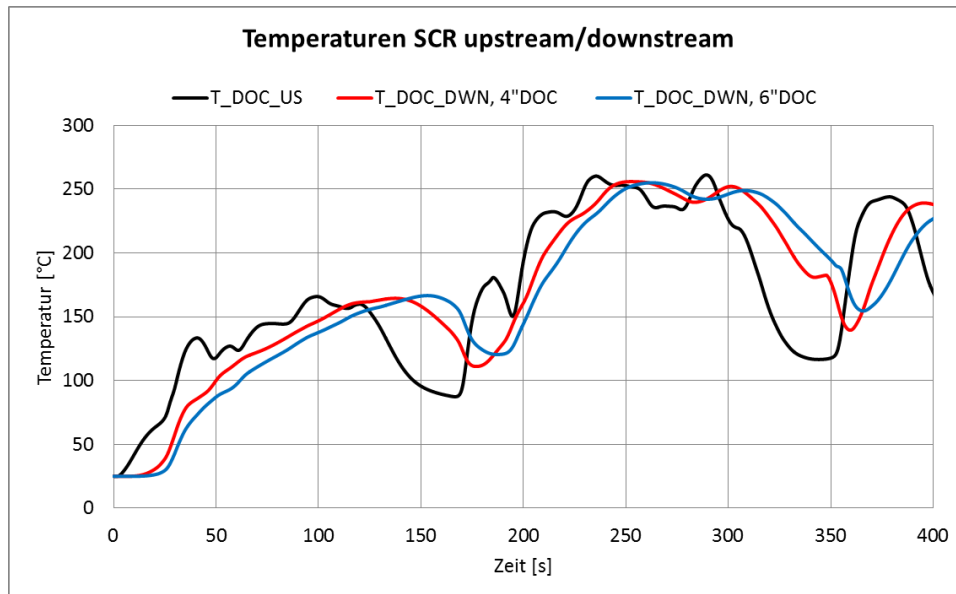


Abb. 5-36; Temperaturspuren DOC upstream und downstream, 4"DOC vs. 6"DOC

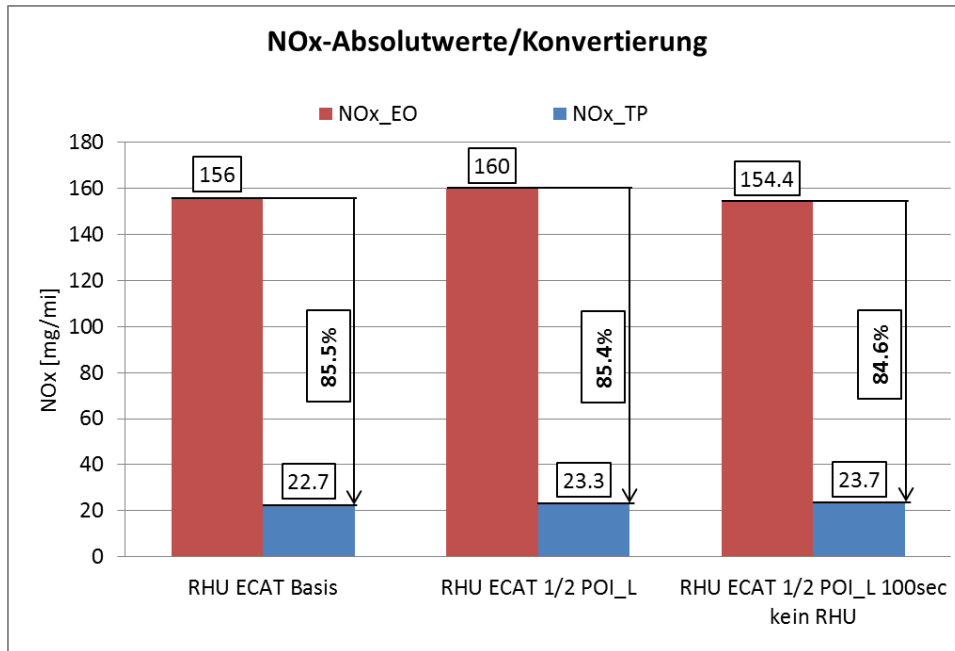
Eine Ausnutzung des Potentials für Konzept2 ist nur dann möglich, wenn der Einsatz der RHU-Funktionen auf die Systemanforderung angepasst wird, da nur durch die DOC-Hardwareanpassung kein akzeptables Ergebnis erzielt werden kann. Daher wird im nächsten Schritt eine Anpassung der RHU-Funktionen basierend auf den bisherigen Erkenntnissen durchgeführt.

### 5.3.3 Anpassung der RHU-Funktion an System2

Aus den bisherigen Ergebnissen des Systems2 wird deutlich, dass eine Anpassung der RHU-Funktionen notwendig ist, aufgrund dessen wird eine detaillierte Betrachtung dieser vorgenommen. Der Schwerpunkt wird dabei auf die  $NMHC$ -Emissionen gelegt, da diese auf das Summenergebnis einen deutlichen Einfluss haben. Dabei wird vorwiegend die späte Nacheinspritzung behandelt, weil diese verantwortlich für die hohen  $TP-NMHC$ -Emissionen ist. Deswegen wurden vorab zwei grundlegende Versuche durchgeführt:

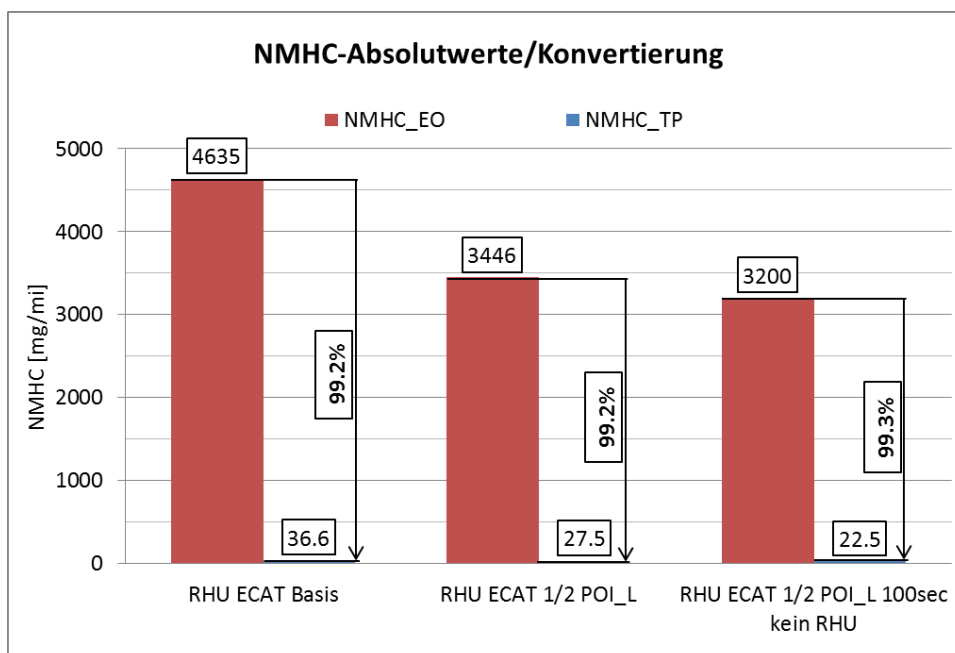
- Menge der späten Nacheinspritzung halbieren
- in den ersten 100 Sekunden während Kaltstartphase kein RHU

Basierend auf dem „RHU ECAT Basis“-Versuch wurden die genannten Punkte untersucht. In Abb. 5-37 sind die kumulierten  $NO_x$ -Emissionen aus diesen Simulationen zu sehen. Wie zu erwarten, ist die  $NO_x$ -Konvertierung, durch die Halbierung der späten Nacheinspritzungsmenge und durch das Aussetzen der RHU-Funktionen in den ersten 100 Sekunden, etwas schlechter als die Basis. Die Unterschiede fallen jedoch nur sehr gering aus und haben somit keinen wesentlichen Einfluss. Der geringere  $NO_x$ -Umsatz kommt dadurch zu Stande, dass das Temperaturniveau am sDPF-Eintritt durch die reduzierte Nacheinspritzungsmenge absinkt.



**Abb. 5-37;** Gegenüberstellung *NO<sub>x</sub>*-Emissionen von "RHU ECAT Basis", "RHU ECAT ½ POI\_L" und "RHU ECAT ½ POI\_L 100sec kein RHU"

Dahingegen sind in den *NMHC*-Emissionen deutliche Unterschiede zu erkennen, wie In Abb. 5-38 ersichtlich ist, sind kumulierte EO-, TP-*NMHC*-Emissionen und die erreichten Konvertierungen für die drei Versuche abgebildet. Durch Halbierung der späten Nacheinspritzungsmenge werden EO-*NMHC*-Emissionen sowie TP-*NMHC*-Emissionen abgesenkt. Mit Hilfe der zweite Maßnahme, das Aussetzen der RHU in den ersten 100 Sekunden, werden die EO- und TP-*NMHC*-Emissionen erneut abgesenkt, damit können die TP-*NMHC*-Emission um bis zu 38% reduziert werden. Diese Maßnahmen zeigen, dass die RHU-Strategie aus der Basis-Kalibrierung für System2 nicht zielführend ist.



**Abb. 5-38;** Gegenüberstellung *NMHC*-Emissionen von "RHU ECAT Basis", "RHU ECAT ½ POI\_L" und "RHU ECAT ½ POI\_L 100sec kein RHU"

Basierend auf der Voruntersuchung wurden für die Anpassung der RHU-Funktionen fünf Bereiche aus der RHU-Parametrierung ausgewählt und anschließend variiert. Außerdem wurden die wassertemperaturabhängigen Schwellen für die RHU-Steuerung auf einen konstanten Wert gesetzt um den erhöhten Heizaufwand während der Kaltstartphase zu reduzieren.

#### **Faktor auf die Menge der späten Nacheinspritzung**

Aus den Ergebnissen der Hardwarevariation des DOCs konnte man entnehmen, dass der hohe Heizbedarf durch die späte Nacheinspritzung nicht notwendig ist, daher wird die Menge der späten Nacheinspritzung mit einem Faktor multipliziert. Damit ist eine Senkung der EO-NMHC-Emissionen sehr einfach möglich.

#### **Faktor auf die Menge der späten Nacheinspritzung für x Sekunden nach Schubetrieb**

Durch längere Schubphasen wird ein Auskühlen des DOCs bedingt, deswegen wurde ein zweiter Faktor auf die Menge der späten Nacheinspritzung aufgeprägt. Die beiden Faktoren auf die Nacheinspritzungsmenge werden mit einem Schalter aktiviert, dadurch kann jeweils nur ein Faktor multiplikativ auf die Menge wirken.

#### **Kein EOM1 und 2 wenn Massendurchsatz durch DOC größer als 180kg/h**

Wie bereits in Kapitel 5.3.2 in Abb. 5-33 gezeigt wurde, kommt es bei höheren Massendurchsätzen zu einem Einbruch der NMHC-Konvertierung und damit zu erhöhten TP-NMHC-Emissionen. Es wurde beschlossen, dass bei hohem Massendurchsatz kein RHU eingesetzt wird.

#### **Kein EOM2 im Leerlauf und y Sekunden nach Leerlauf**

Da für Konzept2 der hohe Heizbedarf nicht zielführend ist, wurde im Leerlauf und kurz danach auf EOM2 verzichtet, somit wird auch ein verbrauchsgünstiger Leerlauf erzielt.

#### **Kein EOM1 und EOM2 in den ersten z Sekunden**

Um möglichst geringe EO-NMHC-Emissionen z Sekunden nach dem Motorstart sicherzustellen, wurde in dieser Zeit generell auf RHU verzichtet (kein EOM1 und EOM2).

In der nachfolgend angeführten Tab. 5-3 werden die durchgeführten Variationen aufgelistet. Die Versuche wurden für die „RHU ECAT“ durchgeführt, das entspricht den ursprünglichen Schwellwerten der RHU-Steuerung bei der Kühlmitteltemperatur von 90°C.



A, Faktor auf die Menge der späten Nacheinspritzung

B, Faktor auf die Menge der späten Nacheinspritzung für x Sekunden nach Schubbetrieb (Faktor/x)

C, kein EOM1 und 2 wenn Massendurchsatz durch DOC größer als 180kg/h

D, kein EOM2 im Leerlauf und y Sekunden nach Leerlauf

E, kein EOM1 und 2 in den ersten z Sekunden

Simulationsergebnis	A	B	C	D	E
RHU ECAT 352	0.5	×	✓	5	×
RHU ECAT 353	0.5	×	✓	5	150
RHU ECAT 354	0.5	×	✓	×	150
RHU ECAT 355	0.5	×	✓	10	100
RHU ECAT 357	0.5	0.25/15	✓	5	100
RHU ECAT 358	0.5	0.25/15	✓	15	100
RHU ECAT 359	0.75	0.5/15	✓	5	100
RHU ECAT 360	0.75	0/15	✓	5	100
RHU ECAT 361	1	0/15	✓	5	100
RHU ECAT 363	1	0.25/10	✓	5	100
RHU ECAT 365	1	0.5/15	✓	5	100
RHU ECAT 366	1	1/15	✓	5	100
RHU ECAT 367	1	0.5/15	✓	5	150

Tab. 5-3: RHU-Variation für System2

Für die RHU-Optimierung wurde Hauptaugenmerk auf die kumulierten TP-NMHC-Emissionen gelegt, weil an den ECAT und DOC hohe Anforderungen hinsichtlich NMHC-Konvertierung gestellt werden. Deswegen wurde versucht, nur dann erhöhte EO-NMHC-Emissionen zu produzieren, wenn ECAT und DOC in der Lage sind diese auch umzusetzen. Mit dieser Maßnahme wird sichergestellt, dass die Betriebsstrategie an die Möglichkeiten der Hardware angepasst wird. Wie bereits in Abb. 5-33 gezeigt wurde, sind die ersten 240 Sekunden des Zyklus ausschlaggebend für die TP-NMHC-Emissionen. Dieser Zeitbereich beinhaltet das Aufwärmen des DOCs und einige Hochlastphasen.

Aus der durchgeführten RHU-Variationsuntersuchung wurde der Versuch mit dem besten Ergebnis (RHU ECAT 365) ausgewählt und die entsprechenden Parameter für die weitere Untersuchung übernommen. Die Charakteristik der angepassten RHU-Funktion hat folgende Spezifikationen:

- Faktor=1 auf die Menge der späten Nacheinspritzung, Basiswert
- Faktor=0.5 auf die Menge der späten Nacheinspritzung für 15 Sekunden nach Schubbetrieb
- Kein EOM1 und 2 wenn Massendurchsatz durch DOC größer als 180kg/h
- Kein EOM2 im Leerlauf und 5 Sekunden nach Leerlauf
- Kein EOM1 und 2 in den ersten 100 Sekunden nach erstmaligem Motorstart

Unter Verwendung der gezeigten Anpassungen konnten die kumulierten TP-NMHC-Emissionen deutlich abgesenkt werden. Aufgrund der reduzierten Heizmaßnahmen in der Anfangsphase wird das Temperaturniveau abgesenkt und damit der NO<sub>x</sub>-Umsatz etwas schlechter. Durch den Vorteil der sich aus den TP-NMHC-Emissionen ergibt, wird der Nachteil aus den TP-NO<sub>x</sub>-Emissionen aufgehoben. In den beiden Abb. 5-39 und Abb. 5-40 sind die kumulierten EO-/TP-NMHC-/NO<sub>x</sub>-Emissionen sowie Temperaturen vor DOC/sDPF und Massendurchsatz der ersten 600 Sekunden des FTP75 dargestellt.

Deutliche Unterschiede sind lediglich in den ersten 300 Sekunden erkennbar, denn genau während dieser Zeit wird bei den „RHU ECAT“-Versuchen mit Basis-Betriebsstrategie der Hauptanteil der TP-Emissionen produziert. Mit den Anpassungsmaßnahmen beim „RHU ECAT 365“-Versuch wird genau in dieser Phase eine Senkung der TP-Emissionen erzielt. Nach 300 Sekunden unterscheiden sich die beiden Versuche nur mehr geringfügig.

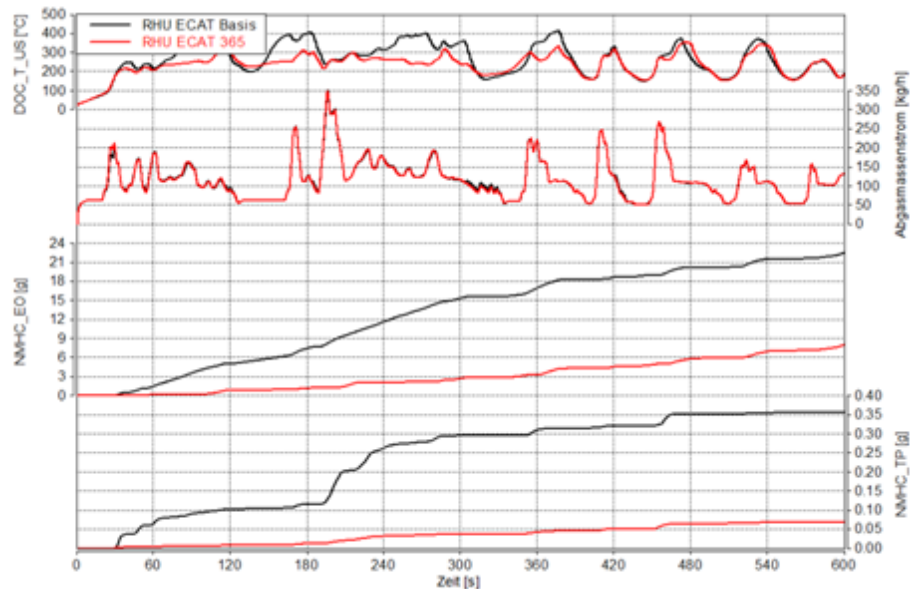


Abb. 5-39, Kumulierte EO-/TP-NMHC-Emissionen „RHU ECAT Basis“ vs. „RHU ECAT 365“

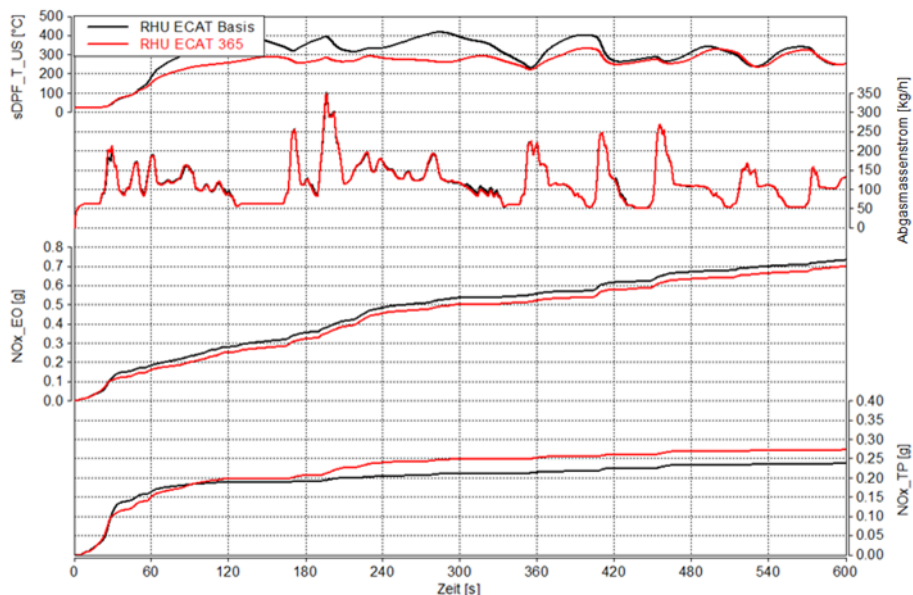


Abb. 5-40; Kumulierte EO-/TP-NOx-Emissionen „RHU ECAT Basis“ vs. „RHU ECAT 365“

Die Ergebnisse mit der angepassten RHU-Funktion zeigen eine deutliche Verbesserung gegenüber der ursprünglichen Parametrierung. Neben der Reduktion der TP-NMHC-Emissionen wird ebenfalls der Kraftstoffverbrauch abgesenkt, das sich wiederum positiv für System2 auswirkt.

### 5.3.4 Zusammenfassung System2

Mit der Ausgangsbasis kann man mit dem ECAT die Grenzwerte für ULEV70 erreichen, dahingegen wird durch den Einsatz der RHU-Funktionen eine deutliche Verschlechterung der Zyklusergebnisse (*NMHC*-Emissionen) verursacht, weil an den ECAT und DOC höhere Anforderungen gestellt sind. Um diese höheren Anforderungen gerecht zu werden, musste die Betriebsstrategie durch den angepassten Einsatz der RHU-Funktion abgeändert werden. Letztendlich ist es auch mit System2 möglich die ULEV50-Grenzwerte einzuhalten. Basierend auf dem letzten Entwicklungsstand des Systems, ist eine Absenkung der Emissionen von Grenzwert ULEV auf ULEV50 möglich, um allerdings die Grenzwerte für SULEV erreichen zu können, sind weitere Maßnahmen notwendig (Abb. 5-41).

Eine Möglichkeit besteht darin, dass die *EO-NO<sub>x</sub>*-Emissionen über die Verbrennung reduziert werden, dies ist besonders bis zum Anspringen des SCR-Systems wichtig, denn bis zu dieser Zeit können keine *NO<sub>x</sub>* konvertiert werden. Eine weitere Möglichkeit wäre durch den Einsatz verbesserter Hardware möglich oder Verwendung eines LNTs. Der LNT ist in der Lage *NO<sub>x</sub>* zu speichern, jedoch ist für die Regeneration der Motorbetrieb im Luftmangelbereich erforderlich. Der  $\lambda < 1$ -Betrieb hat weitere Probleme zur Folge wie etwa erhöhte Partikel-, *CO*- und *HC*-Emissionen.

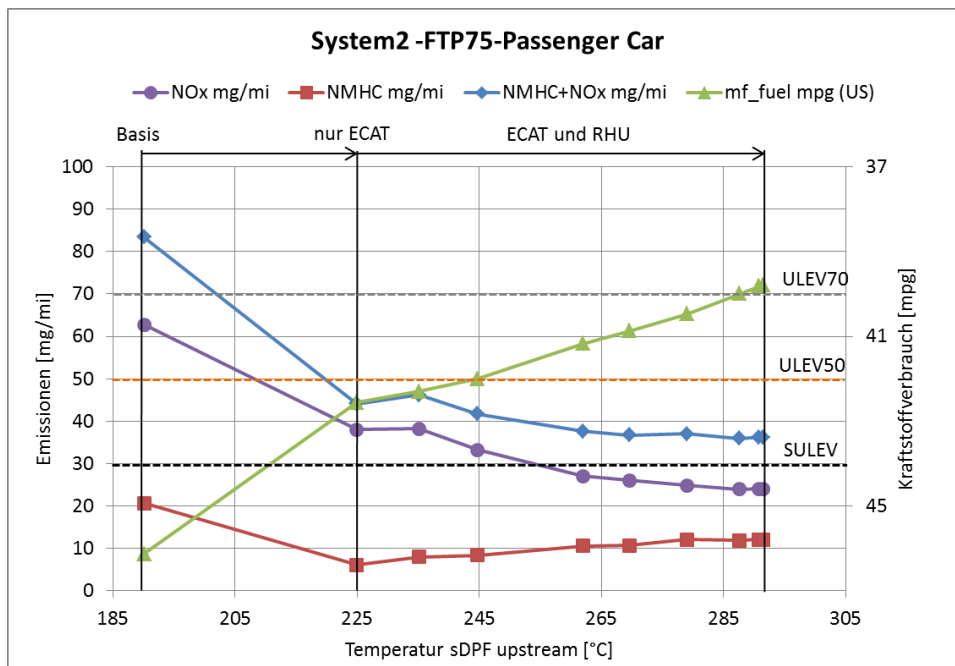


Abb. 5-41: Zyklusergebnis System2 für FTP75 6"DOC+50% optimierte RHU-Funktionen

### 5.4 Abgasnachbehandlungssystem3

Neben den beiden anderen Systemen wird in System3 ein etwas anderer Aufbau untersucht. Aufgebaut ist das Konzept3 aus einem DOC vor Turbine (PTDOC, Pre Turbine DOC), DOC730, sDPF722 und SCRI736. Ebenso wie für System1 und 2 würde in der Fahrzeuganwendung ein Slip-CAT nach SCRI eingesetzt werden. Im Laufe der Untersuchungen soll festgestellt werden, ob der DOC730 für dieses Konzept notwendig ist.

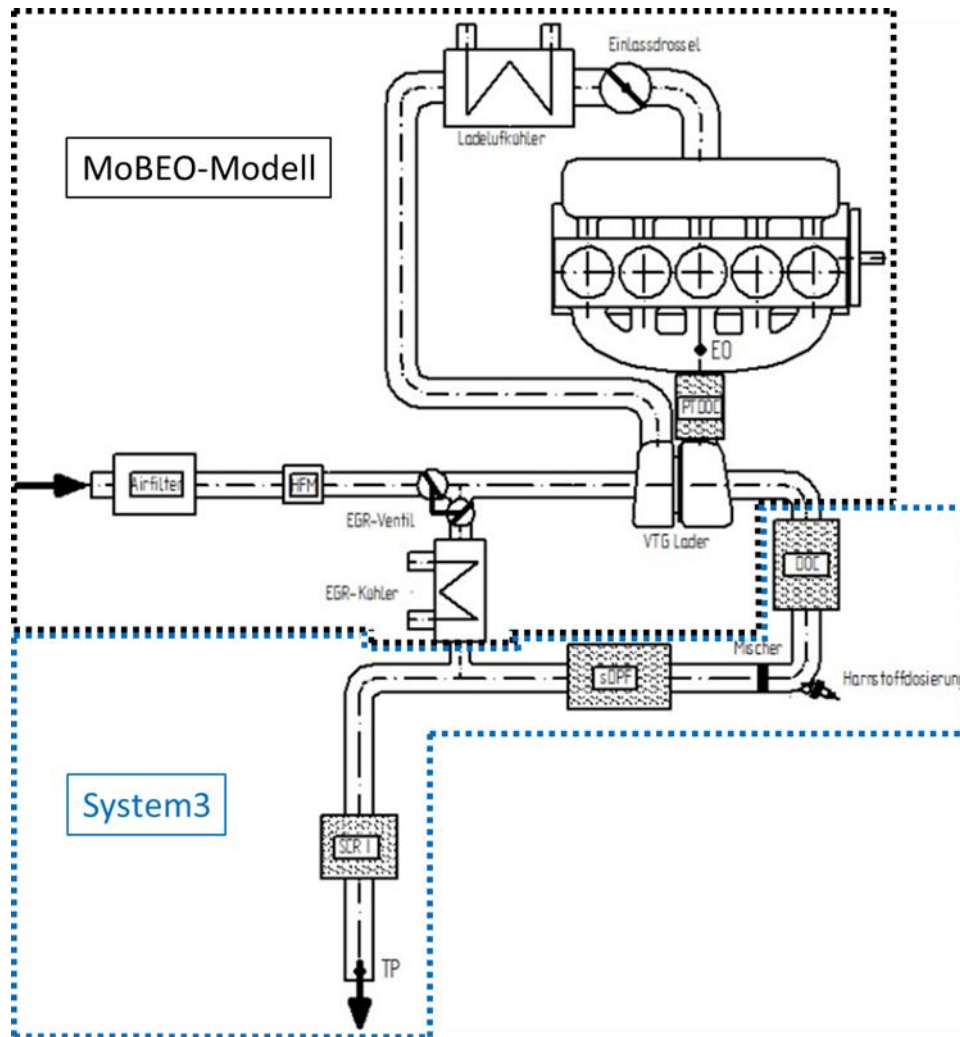


Abb. 5-42; Prinzipdarstellung Abgasnachbehandlungssystem3

Die Grundidee des System3 ist es, den bis jetzt verwendeten ECAT durch den PTDOC zu ersetzen. Der Einsatz eines ECATs ist generell eine gute Idee, da in Schub und Niederlastphasen die Abgastemperatur durch ein aktives Heizelement einfach angehoben werden kann, jedoch ergeben sich durch den Einsatz auch gewisse Nachteile. Vorwiegend wird der ECAT während der Warmlaufphase eines Motors eingesetzt um das EAS möglichst rasch auf Betriebstemperatur zu bringen, genau während dieser Zeit wird das Bord-Netz durch zahlreiche elektrische Verbraucher stark belastet (z.B. Sitzheizung, Klimaanlage, Scheibenheizung, Lichtanlagen, etc.). Um eine wirksame Temperaturerhöhung mit dem ECAT erreichen zu können, benötigt man hohe elektrische Leistungen die aus der Batterie entnommen wird. Aufgrund dessen ist die Anwendung eines ECATs für den PKW-Einsatz nicht immer erwünscht.

Für Konzept3 wird die Annahme getroffen, dass ausreichend Platz für einen DOC vor Turbine vorhanden ist und daher werden keine geometrischen Anpassungen durchgeführt. Die Anwendung in

der Praxis hingegen würde grundlegende Veränderungen des Abgassammlers erfordern, da Verbindungselemente zwischen Zylinderkopfaustritt bis Turbineneintritt möglichst kurz sein müssen um Wärmeverluste klein zu halten und um eine optimale Ausnutzung der Ladungswechsel-Druckwellen gewährleisten zu können [22]. Um mit dem PTDOC eine wirksame Exotherme erzeugen zu können, muss andererseits ein entsprechend größeres CAT-Volumen vorliegen. Jedoch mit größer werdendem Volumen steigen thermische Masse und generell auch der Gegendruck. Die Dimensionierung erfordert daher einen Kompromiss zwischen *NMHC*-Umsatz (Exotherme) und Ansprechverhalten bzw. Ladedruckaufbau.

Die in Tab. 5-4 angeführten Punkte wurden für System3 gerechnet und untersucht. Vorab wurde eine Variation des PTDOC-Volumens durchgeführt. Nach Durchsicht der Simulationsergebnisse wurde ein passendes Volumen gewählt und danach entschieden, ob auf einen weiteren DOC verzichtet werden kann. Für Konzept3 wurde wie für Konzept2 eine Anpassung der RHU-Funktionen durchgeführt, da die ursprüngliche Parametrierung den Anforderungen nicht gerecht wurde.

Bezeichnung	Beschreibung
PTDOC	Vorauslegung PTDOC-Volumen
Ausgangsbasis 6“DOC+50%	Entscheidung und Festlegung DOC nach Turbine
6“DOC+50%, RHU Parametervariation	Anpassung der RHU-Funktionen, hauptsächlich Menge für späte Nacheinspritzung und Temperaturschwellen

**Tab. 5-4;** Durchgeführte Variationsrechnungen für System3

Die Vorgehensweise mit dem PTDOC unterscheidet sich nur geringfügig von der ursprünglichen, die für Konzept1 und Konzept2 angewandt wurde. Bis dato wurden mit dem Zylindermodell lediglich die Input-Daten für die anschließende Offline-Simulation des EAS gerechnet. Aufgrund der Positionierung des DOC vor Turbine, ist die Einbindung des DOC-Modells in das Zylindermodell notwendig, um den Einfluss des DOCs auf die Turbine mitzunehmen. Während dieser Versuche wurde besonders Wert auf ein fehlerfreies Rechnen des PTDOCs gelegt.

#### 5.4.1 Hardwarevariation, PTDOC-Volumen

In diesem Abschnitt wird detailliert auf den PTDOC eingegangen. Dabei kommt der Wahl des passenden Katalysatorvolumens große Bedeutung zu, da dies ein signifikanter Parameter für die Funktionsweise ist. Für das PTDOC-Modell wurden die Kinetik-Parameter des DOC-Modells übernommen und als Trägermaterial wurde statt Codieret ein Metallträger gewählt. Die vorherrschenden Strömungsbedingungen werden durch das verwendete Modell nicht berücksichtigt, da diese unabhängig vom Druck rechnen. Bei keramischen Trägermaterialien kann es unter Umständen zu Ablösungen vom Substrat kommen, die wiederum in der Lage sind die Turbine zu beschädigen. Ein weiterer Vorteil des Metallträgers ist seine geringere thermische Trägheit aufgrund der Werkstoffeigenschaften und der damit verbundenen Geometrie (geringe Wandstärken).

Um einen generellen Überblick über den Einfluss unterschiedlicher Katalysatorvolumina auf das System zu bekommen, wurde dafür das Volumen des PTDOC von 0.25 bis 2 Liter variiert. Die Variationsrechnungen wurden mit der „Basis“ durchgeführt (ohne RHU). In Abhängigkeit des PTDOC-Volumens ändern sich die Bedingungen für die Turbine und somit auch für den Kompressor. Um ein besseres Verständnis für den Einfluss des PTDOC-Volumens auf den Turbolader zu bekommen sind in Abb. 5-43 die Ergebnisse für unterschiedliche DOC-Volumen (0.5, 1 und 2 Liter) und ohne PTDOC

gezeigt, darin enthalten sind die Temperatur vor Turbinen-Eintritt und den Druck nach Kompressor-Austritt. Der Einfluss der Temperatur und Druck nimmt mit größer werdendem Volumen immer stärker zu. Aufgrund dessen muss darauf geachtet werden, dass der erreichte Druck nach Kompressor durch den reduzierten Enthalpie-Strom vor Turbine-Eintritt, nicht zu stark absinkt.

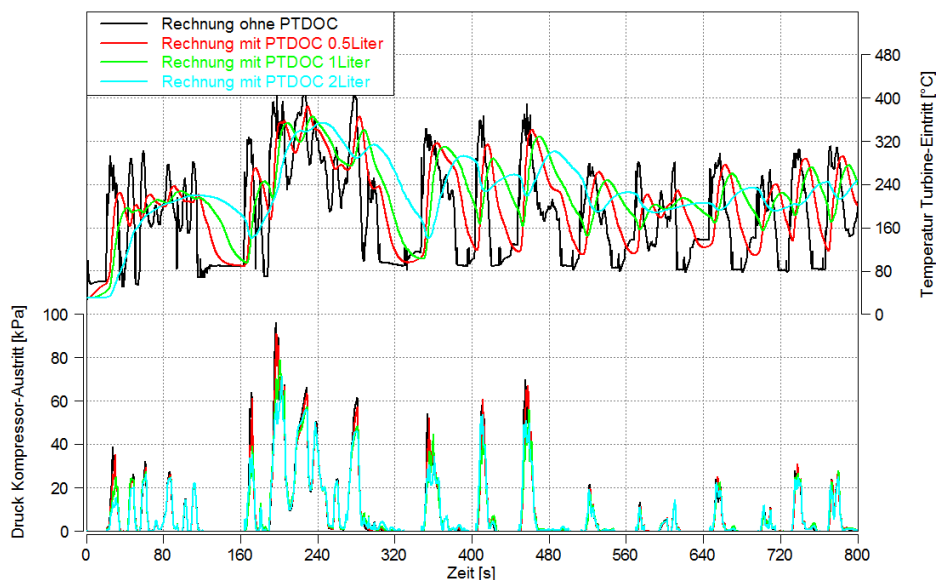


Abb. 5-43; Ausschnitt FTP75 Temperatur/Ladedruck vor und nach PTDOC

Der Einfluss der unterschiedlichen Volumina auf  $CO$ - und  $NMHC$ -Umsatz ist in Abb. 5-44 abgebildet. Die  $CO$ -Konvertierung befindet sich bereits bei kleinen Volumina in einer guten Größenordnung, dahingegen ist der  $NMHC$ -Umsatz sehr stark vom Volumen abhängig.

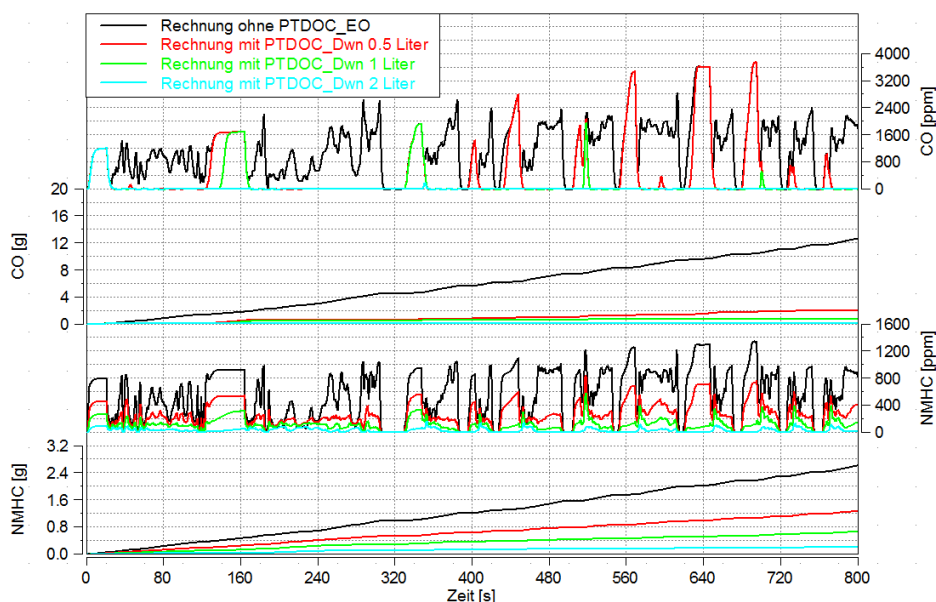


Abb. 5-44; Ausschnitt FTP75 kumulierte  $CO$ -/ $NMHC$ -Emissionen vor und nach PTDOC

Aufgrund der gezeigten Abhängigkeiten musste bei der Wahl des PTDOC-Volumens ein Kompromiss zwischen Ladedruck und Konvertierung getroffen werden. Hiermit wird auch klar, dass ein zweiter DOC nach Turbine notwendig ist, damit die geforderten TP-Emissionen erreicht werden können.

Nachdem die einzelnen Simulationsmodelle den Druck nicht berücksichtigen, muss dieser auf eine andere Weise für den PTDOC berücksichtigt werden. Bisher konnte der Einfluss des Druckes vernachlässigt werden. Bei der Anwendung vor der Turbine wiederum liegt das Druckniveau höher und muss daher in das Modell einfließen. Der erhöhte Druck und damit auch die höhere Dichte wirken sich bei gegebenem Massendurchsatz auf den Volumenstrom und somit auch auf die Raumgeschwindigkeit aus. Unter Berücksichtigung des Druckes wurde für den PTDOC ein Volumen von 1 Liter gewählt und zusätzlich wurden die K-Parameter um 50% angehoben um die Funktionsweise zu verbessern.

Basierend auf den Ergebnissen für System1 und System2 wurde der 4“DOC durch den 6“DOC+50% ersetzt und stellt hiermit die Ausgangsbasis für das EAS System3 dar.

#### 5.4.2 System3, Ausgangsbasis 6“DOC und mit 50% höhere Kinetik-Parameter

Nachdem für System3 die Ausgangsbasis in Kapitel 5.4.1 fixiert wurde, verlief das weitere Vorgehen für die Modellanwendung wie bisher, mit dem Unterschied, dass lediglich ein reduzierter Umfang gerechnet wurde:

- Basis ohne RHU
- RHU (Variation der Temperaturschwellen für EOM2, Menge der späten Nacheinspritzung halbiert)

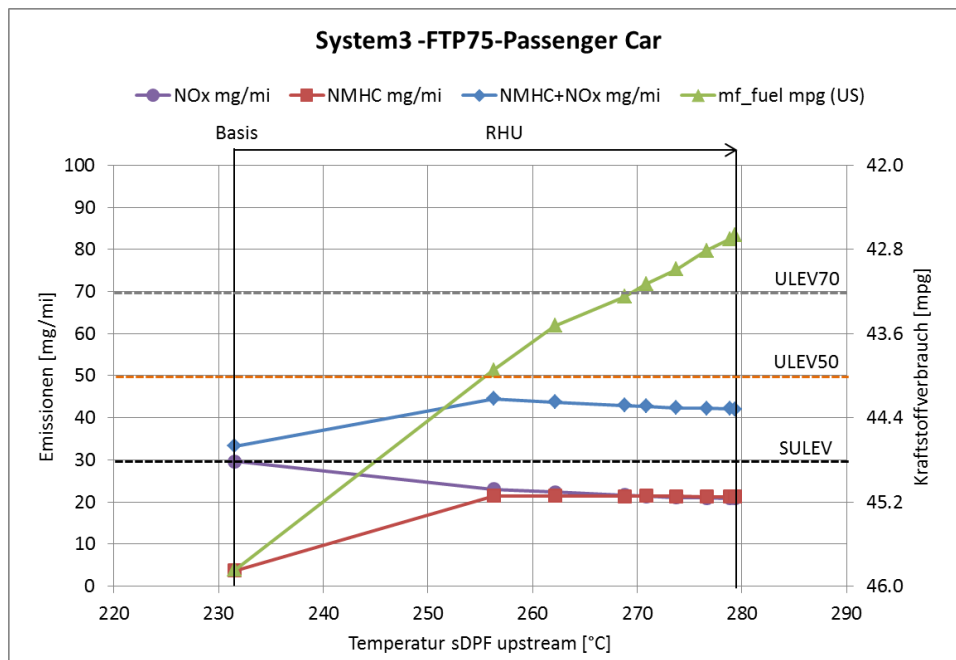


Abb. 5-45; Zyklusergebnisse System3 für FTP75 mit 6“DOC+50%

Für die Ausgangsbasis wurde die Menge der späten Nacheinspritzung halbiert, da die ursprünglich verwendete Menge für das Konzept3 mit PTDOC zu hoch erschien. Die Ergebnisse für die Ausgangsbasis (1 Liter PTDOC und 6“DOC+50%) sind in Abb. 5-45 dargestellt. Bereits mit der Basis-Konfiguration ist die Gesetzgebung für ULEV50 erreichbar. Die geringen TP-NMHC-Emissionen sind durch die beiden DOCs erreichbar, da der PTDOC durch die höheren Temperaturen bereits sehr früh



Betriebstemperatur erreicht und zusätzlich wird ein guter  $NO_x$ -Umsatz basierend auf dem hohen Temperaturniveau bei sDPF-Eintritt erzielt. Dahingegen verschlechtern sich die TP- $NMHC$ -Emissionen mit der Verwendung der RHU-Funktionen, dieselbe Charakteristik wurde auch in System2 ersichtlich. Daraus folgte, dass auch für System3 eine Anpassung der RHU-Funktionen notwendig ist.

Eine weitere interessante Information liefert Abb. 5-46. Darin sind die kumulierten  $NO_x$ -Werte EO und TP sowie Konvertierung für den FTP75 gezeigt. Mit Konzept3 liegt nur ein geringes Potential für den  $NO_x$ -Umsatz vor, da bereits für die Basis-Konfiguration ein ausreichend hohes Temperaturniveau erreicht wird. Ein weiterer Grund für die gute  $NO_x$ -Konvertierung ist das fehlende elektrische Heizelement, der im Betrieb erhöhte EO- $NO_x$ -Emissionen zur Folge hat (infolge der Lastpunktanhebung). Besonders in der Warmlaufphase, in der das SCR-System noch keine  $NO_x$  umsetzen kann, entfallen für Konzept3 die erhöhten EO- $NO_x$ -Emissionen.

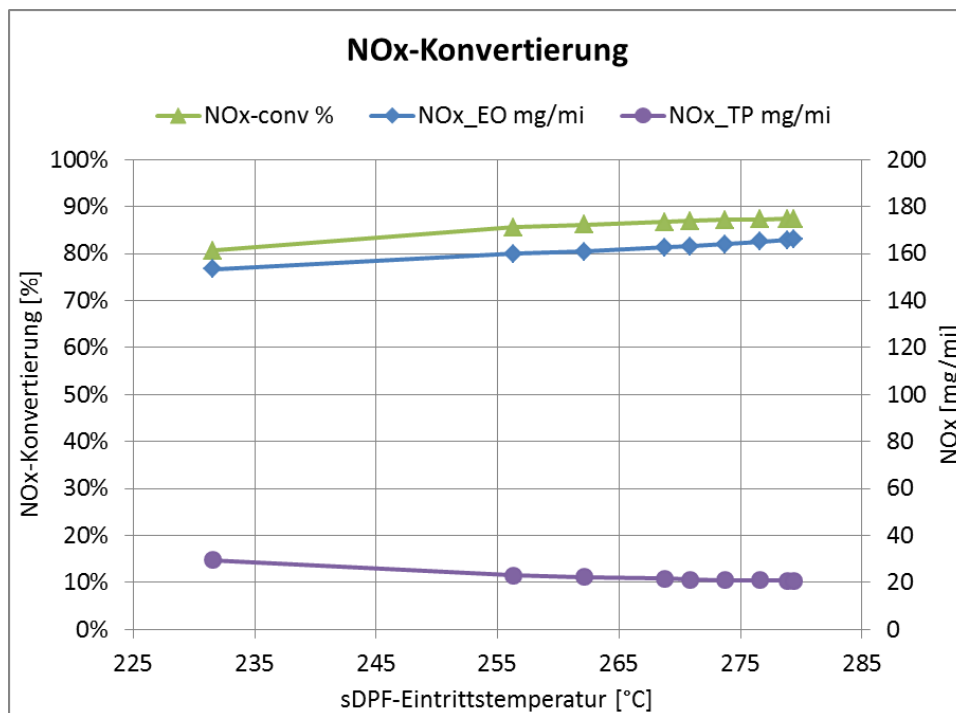


Abb. 5-46;  $NO_x$ -Konvertierung im FTP75 für System3 mit Basiseinstellungen und 6"DOC+50%

Durch die Anwendung der RHU-Funktion steigen die TP- $NMHC$ -Emissionen im Vergleich zur Basis an, dieses Verhalten wird durch eine falsch eingesetzte RHU-Funktion verursacht und durch die Betrachtung der kumulierten TP- $NMHC$  in Abb. 5-47 untermauert. Durch die ursprünglich verwendeten Temperaturschwellen für EOM2 ergeben sich in den ersten 400 Sekunden dieselben  $NMHC$ -Emissionen. Um akzeptable TP- $NMHC$ -Emissionen mit dem System3 erreichen zu können, ist es notwendig die RHU-Funktionen auf das PTDOC-Konzept anzupassen (ähnliche Vorgehensweise wie für System2).



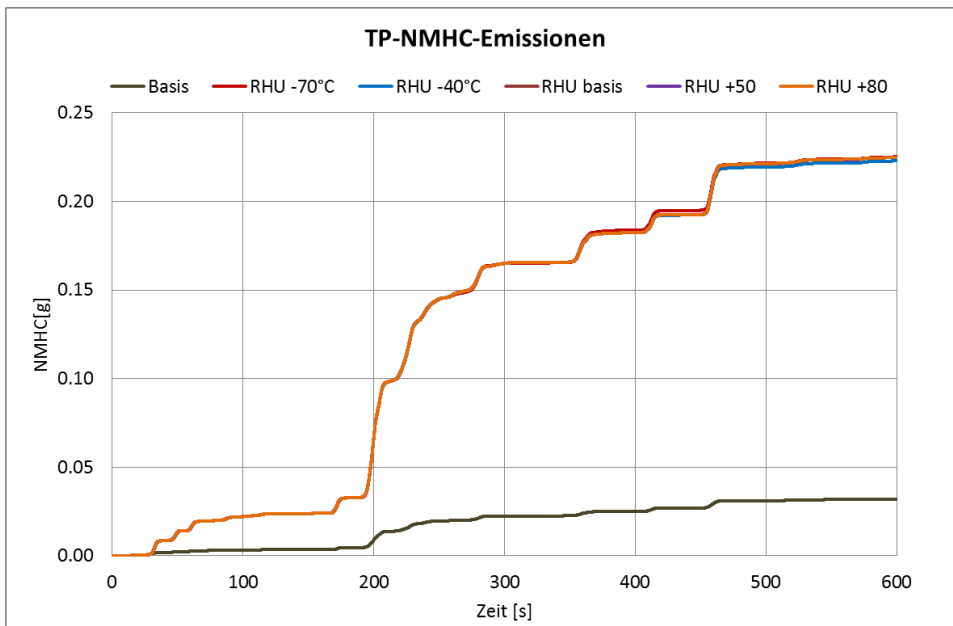


Abb. 5-47; TP-NMHC-Emissionen während den ersten 600 Sekunden des FTP75

Um die Ursache des geringen *NMHC*-Umsatzes herauszufinden, muss die Situation am DOC nach Turbine gezeigt werden. In Abb. 5-48 und Abb. 5-49 sind hierfür die *NMHC*-Emissionen in ppm/g/h bei DOC-Eintritt (nach Turbine) und TP sowie der Massendurchsatz und die Temperatur bei DOC-Eintritt für die ersten 600 Sekunden abgebildet. Die schwarz gekennzeichneten Größen entsprechen den Eingangsgrößen für den 6“DOC+50% und die rot markierten den TP-Größen. Die **Phase1** kennzeichnet die Kaltstartphase des FTP75 und die **Phase2** beinhaltet die transiente Phase und die Warmstartphase. Der Bereich der Phase2 ist nur in den ersten Sekunden abgebildet, da dieser für die TP-NMHC-Emissionen eine untergeordnete Rolle spielt. Durch den fehlenden ECAT sinkt das Temperatur-Niveau im Leerlauf und Schubbetrieb bei DOC-Eintritt. Zusätzlich ist der Massendurchsatz an den Stellen geringerer Eintrittstemperatur höher.

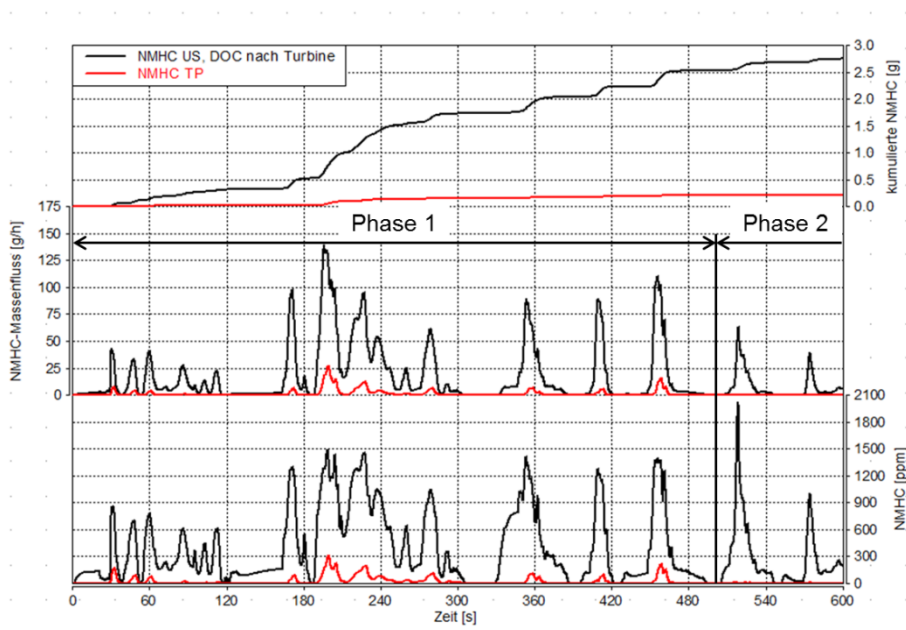
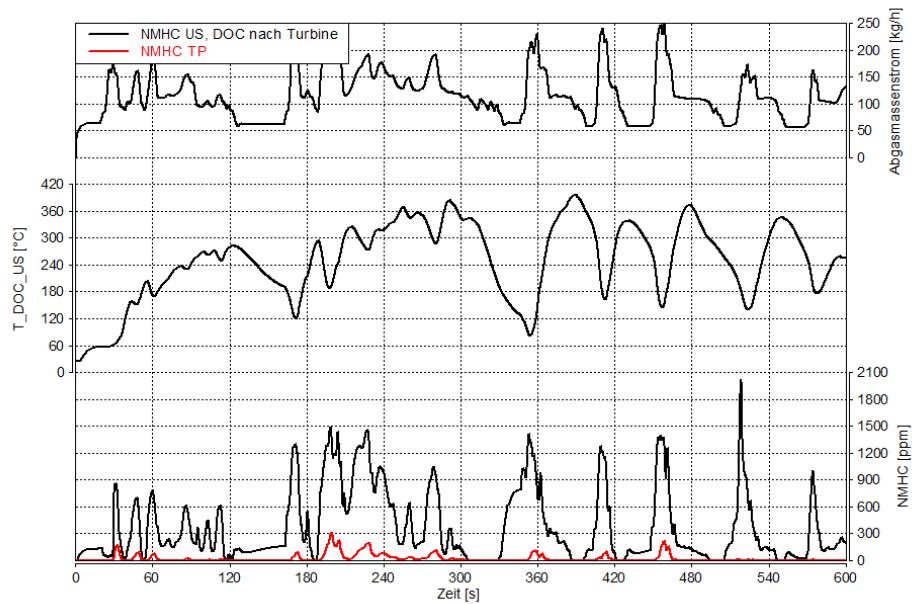


Abb. 5-48; EO/TP-NMHC-Emissionen in ppm/g/h und kumuliert in g



**Abb. 5-49;** NMHC-Emissionen EO/TP in ppm, Temperatur DO-Eintritt und Abgasmassenstrom

Zusammengefasst kann gesagt werden, dass eine Anpassung der RHU-Funktion notwendig ist, damit das Potential des Systems<sup>3</sup> ausgenutzt werden kann. Wichtige Bereiche sind dabei:

- ersten 300 Sekunden der Kaltstartphase
- Bereiche höhere Massendurchsätze
- Leerlaufphasen (da geringe Temperatur)

Ziel ist es, die TP-NMHC-Emissionen im Bereich des Kaltstartes zu reduzieren und zugleich die Anpassung der RHU-Funktionen zum Warmhalten des EAS durchzuführen. Damit sollen die kumulierten TP-NMHC+NO<sub>x</sub>-Emissionen auf SULEV-Niveau abgesenkt werden.

### 5.4.3 Anpassung der RHU-Funktion an System<sup>3</sup>

Aus den bisherigen Ergebnissen wurde deutlich, dass für System<sup>3</sup> ein gewisses Potential hinsichtlich der TP-NMHC-Emissionen vorhanden ist. Daher wurden die RHU-Funktionen, besonders die späte Nacheinspritzung, auf Basis der bisher erlangten Erkenntnisse angepasst. Folgende Schritte wurden für die Anpassung der RHU-Funktion durchgeführt:

- Änderung der Temperaturschwelle für RHU-Steuerung
- Anpassung der späten Nacheinspritzung, sowohl Menge als auch Einsatzzeit

In Tab. 5-5 sind die durchgeführten Variationen für die RHU-Anpassung eingetragen. In Kapitel 5.3.3 wurde bereits eine ausführliche Beschreibung bestimmter Effekte der RHU-Funktion auf System<sup>2</sup> erläutert. Für Konzept<sup>3</sup> bleiben diese Aussagen gültig und werden daher nicht erneut ausgeführt.

A, Temperaturschwelle für RHU-Umschaltung basis/konstant (b/k)

B, Faktor auf die Menge der späten Nacheinspritzung

C, kein EOM2 während 5 Sekunden nach Schubbetrieb

D, kein EOM2 im Leerlauf + weiter 5 Sekunden

E, kein EOM1 und 2 während den ersten 200 Sekunden

F, kein EOM1 und 2 wenn Massendurchsatz durch DOC größer als 180kg/h

Simulationsergebnis	A	B	C	D	E	F
S3	b	0.5	✗	✗	✗	✗
S3_1	k	0.5	✗	✗	✗	✗
S3_2	k	0.25	✗	✗	✗	✗
S3_3	k	0.25	✓	✗	✗	✗
S3_4	k	0.25	✓	✗	✓	✗
S3_5	k	0.25	✓	✓	✓	✗
S3_6	k	0.25	✓	✓	✓	✓
S3_7	k	0.5	✓	✓	✓	✓
S3_8	k	0.75	✓	✓	✓	✓
S3_9	k	1	✓	✓	✓	✓

Tab. 5-5; RHU-Variationen für System3

Die kumulierten Ergebnisse für  $NO_x$ ,  $NMHC$  und  $NMHC+NO_x$  aus dieser RHU-Variation sind in Abb. 5-50 für den FTP75 abgebildet, darin sind die Auswirkungen der einzelnen Maßnahmen erkennbar. Wie zu erwarten ist, bedingt die Reduktion der TP- $NMHC$ -Emissionen einen Anstieg der TP- $NO_x$ -Emissionen. Das beste Ergebnis, hinsichtlich TP- $NMHC+NO_x$ -Emissionen, bekommt man mit den Einstellungen aus Versuch S3\_9. Damit wird gezeigt, dass der Einsatz der späten Nacheinspritzung auf die Anforderungen des Systems3 abgestimmt werden muss um die geforderten Emissionsgrenzen erreichen zu können.

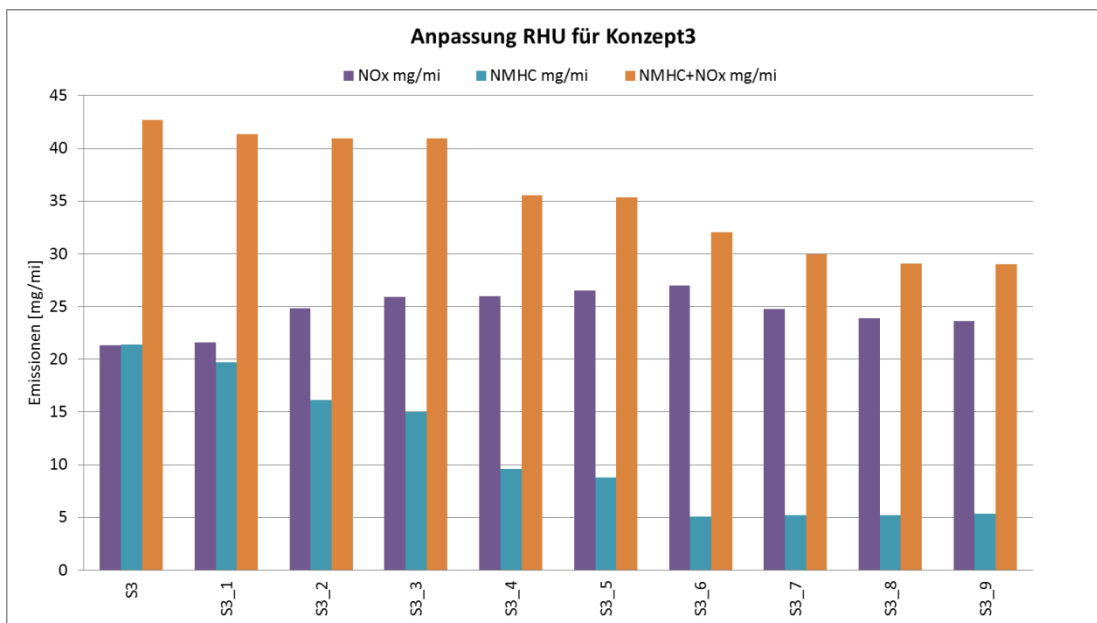


Abb. 5-50; Ergebnisse aus RHU-Variation für System3

Aus der RHU-Variation konnten folgende Einstellungen für die RHU-Funktionen für Konzept3 ermittelt werden:

- Faktor=1 auf die Menge der späten Nacheinspritzung, Basiswert
- Kein EOM2 für 5 Sekunden nach Schubbetrieb
- Kein EOM1 und 2 wenn Massendurchsatz durch DOC größer als 180kg/h
- Kein EOM2 im Leerlauf und 5 Sekunden nach Leerlauf
- Kein EOM1 und 2 in den ersten 200 Sekunden nach erstmaligem Motorstart

Mit Hilfe der RHU-Anpassung ist eine effektive Absenkung der TP-NMHC-Emissionen möglich. Um den Effekt der getroffenen Maßnahmen deutlich zeigen zu können sind in Abb. 5-51 und Abb. 5-52 die NMHC- und NO<sub>x</sub>-Emissionen nach der Turbine und EO dargestellt, zusätzlich sind auch noch die beiden Temperaturen vor DOC- und sDPF-Eintritt sowie der Massendurchsatz abgebildet.

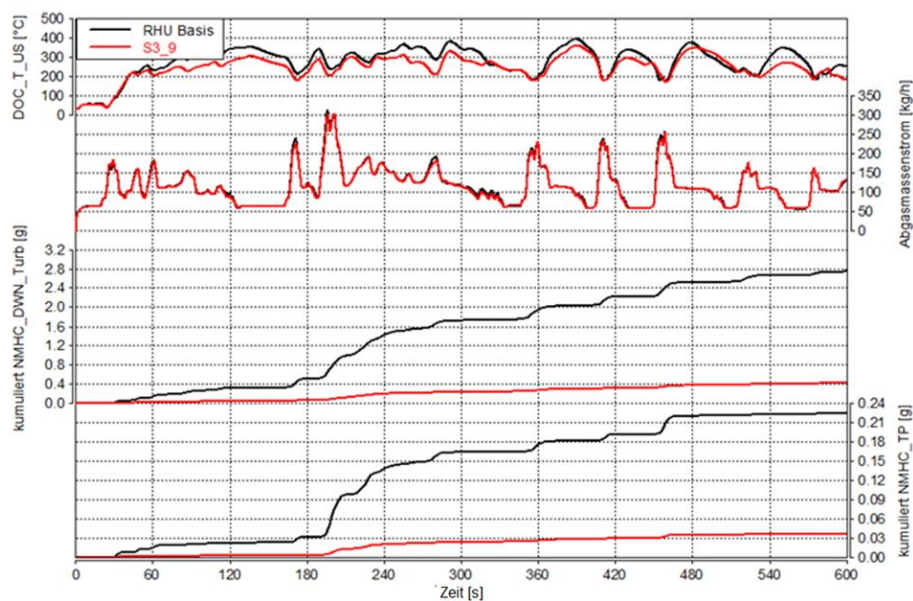


Abb. 5-51; Kumulierte EO-/TP-NMHC-Emissionen „RHU Basis“ vs. „S3\_9“

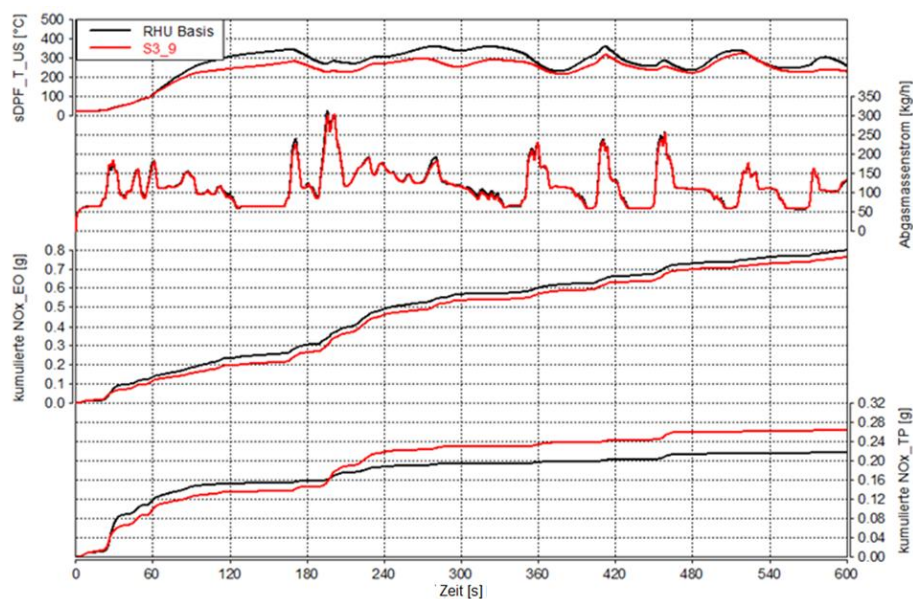
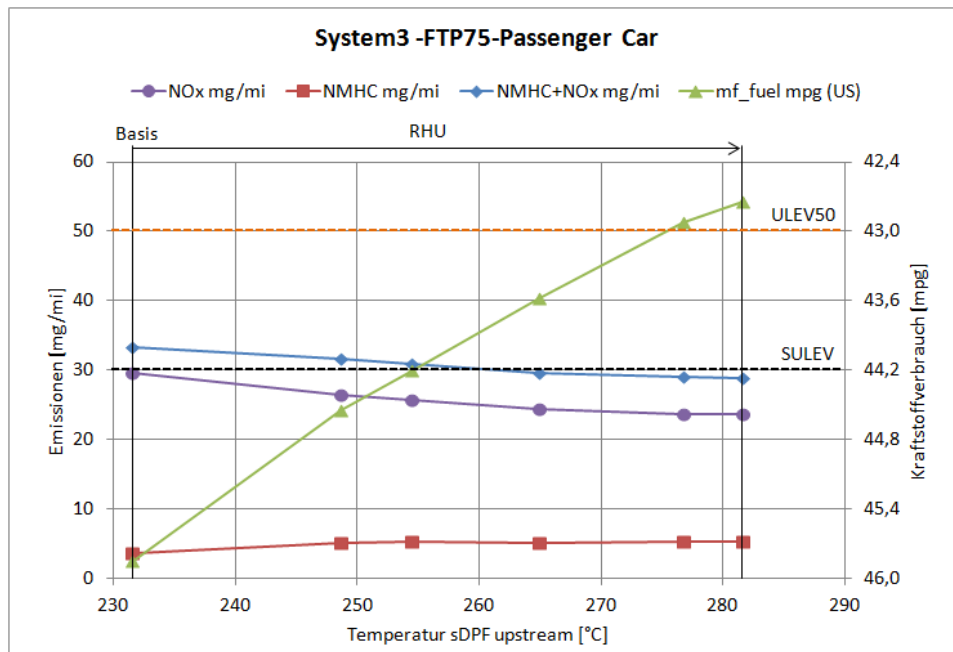


Abb. 5-52; Kumulierte EO/TP-NO<sub>x</sub>-Emissionen „RHU Basis“ vs. „S3\_9“

Die Charakteristik von System3 entspricht derselben wie der von System2. Um die TP-NMHC-Emissionen absenken zu können, muss eine geringe Zunahme der TP-NO<sub>x</sub>-Emissionen in Kauf genommen werden. Durch das fehlende Heizelement reagiert jedoch das Konzept3 etwas sensibler auf Betriebspunkte mit geringerer Abgastemperatur.

Mit den Einstellungen aus Versuch S3\_9 wurde die Temperaturschwelle für EOM2 variiert und die Ergebnisse in Abb. 5-53 gezeigt. Aus der Abbildung ist nur ein geringes Potential für System3 erkennbar. Der Einsatz der RHU-Funktionen bewirkt eine geringfügige Verbesserung der TP-NMHC+NO<sub>x</sub>-Emissionen, wobei dieser Vorteil mit dem Nachteil des Mehrverbrauches bis zu 0.6 L/mi gegenzurechnen ist.



**Abb. 5-53;** Zyklusergebnisse System3 für FTP75 min 6"DOC+50% optimierte RHU-Funktionen

Um zu verstehen wieso keine deutliche Verbesserung der TP-NO<sub>x</sub>-Emissionen mit steigender Temperaturschwelle für EOM2 zu erreichen ist, muss verstanden werden in welcher Phase des FTP75 die TP-NO<sub>x</sub>-Emissionen entstehen. Dafür sind in Abb. 5-54 die kumulierten EO-/TP-NO<sub>x</sub>-Emissionen in den ersten 800 Sekunden des FTP75 abgebildet.

Damit wird gezeigt, dass ein Großteil der TP-NO<sub>x</sub>-Emissionen in der Kaltstartphase während den ersten 265 Sekunden erzeugt werden, das entspricht, bezogen auf den FTP75, einem Anteil von 70-75% (je nach EOM2 Temperaturschwelle) am Zyklusergebnisse. In den hier gezeigten Zeitbereich entspricht der Anteil zwischen 79-85%, das bedeutet, dass eine Senkung der TP-NO<sub>x</sub>-Emissionen für das System3 vorwiegend durch die Senkung der EO-NO<sub>x</sub>-Emissionen möglich ist.

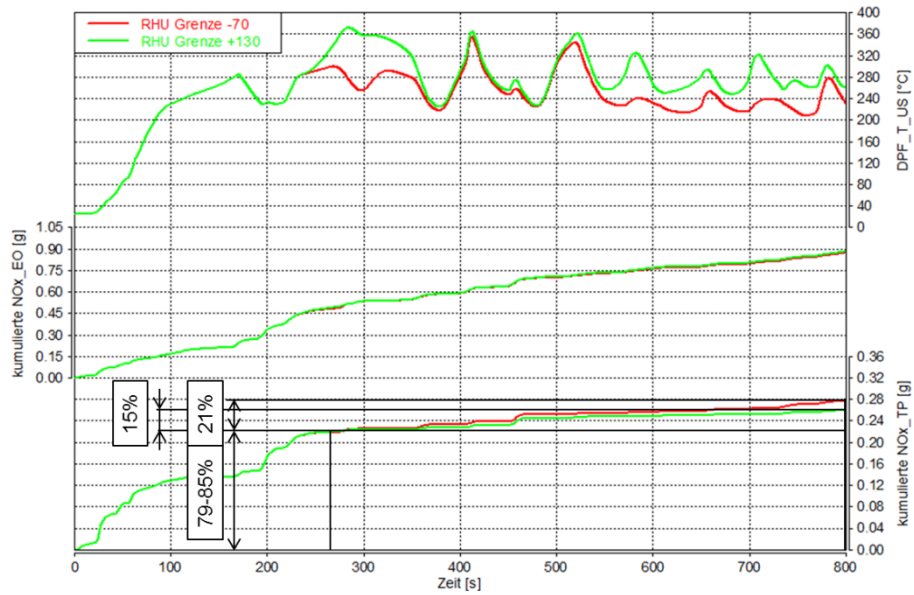


Abb. 5-54; Ursprung der TP-NOx-Emissionen, gezeigt in den ersten 800 Sekunden des FTP75

### 5.4.4 Zusammenfassung System3

Die Ausgangsbasis für System3 bestand bereits aus einem größeren und besseren DOC. Der verbesserte DOC wurde auf Grund der Ergebnisse für System1 und System2 gewählt um eine erneute Wiederholung der Hardwarestudie für den DOC zu vermeiden. Dadurch konnte mit den verwendeten Modellen bereits ohne Einsatz der RHU-Funktionen ein sehr gutes Ergebnis erzielt werden. Ausschlaggebend dafür war das gewählte Volumen für den PTDOC von 1 Liter, der für den FTP75 einen guten Kompromiss zwischen NMHC-Umsatz und Ladedruckaufbau ergab.

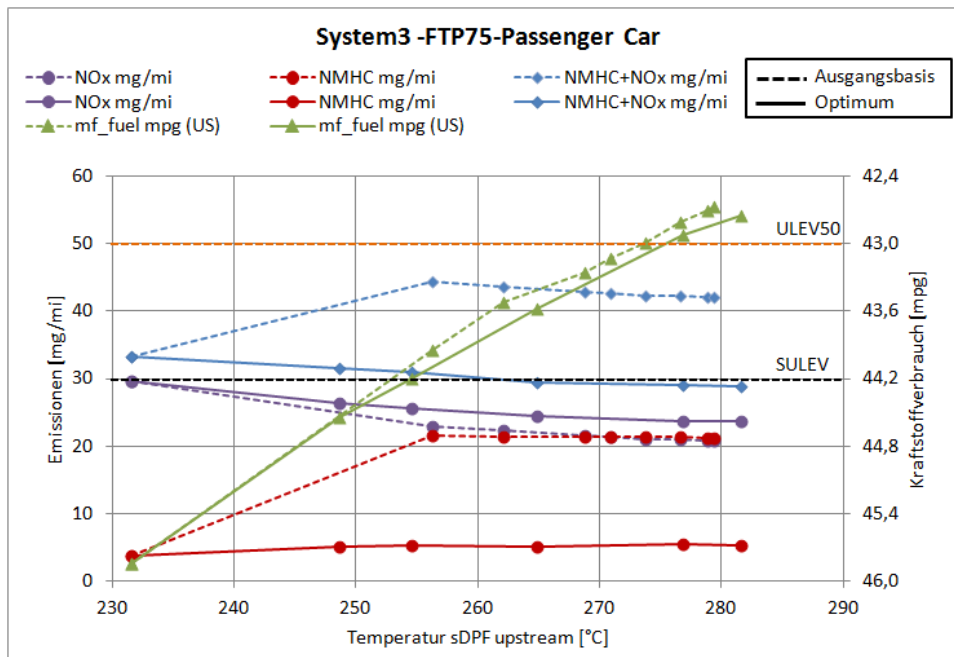


Abb. 5-55; Zyklusergebnisse System3 für FTP75 mit "Ausgangsbasis" vs. "Optimiert"

Bezogen auf einen anderen Zyklus muss erneut die Abstimmung des Volumens für den DOC vor Turbine durchgeführt werden. Durch den Einsatz der ursprünglichen RHU-Funktionen ist keine



Verbesserung möglich, da wie bei System2 die Anforderungen hinsichtlich *NMHC*-Umsatzes nicht erfüllt werden. Nachdem die *RHU*-Funktionen auf das System3 angepasst wurde, konnte eine geringe Verbesserung der *NMHC+NO<sub>x</sub>*-Emissionen erzielt werden. Den direkten Vergleich zwischen Ausgangsbasis und optimiertem System zeigt Abb. 5-55.

Um für System3 die *TP-NO<sub>x</sub>*-Emissionen weiter absenken zu können, sind andere Maßnahmen erforderlich. Einerseits liegt noch Potential in der Verbrennung, indem die *EO-NO<sub>x</sub>*-Emissionen vorzugsweise während der Kaltstartphase abgesenkt werden, da ein Hauptteil der *TP-NO<sub>x</sub>*-Emissionen genau in dieser Zeit entstehen, in der das *SCR*-System nicht betriebsbereit ist. Andererseits besteht die Möglichkeit, dass ein *NO<sub>x</sub>*-Speicherkatalysator eingesetzt wird. Dieser besitzt die Eigenschaft *NO<sub>x</sub>* einzuspeichern zu können, bedingt jedoch einen Motorbetrieb im Luftmangelbereich in dem die Speicherplätze regeneriert werden. Diese beiden Möglichkeiten werden im Rahmen dieser Arbeit nicht behandelt.

## 5.5 Schlussfolgerung

Das untersuchte Abgasnachbehandlungssystem1 bietet gute Voraussetzungen um zukünftige Emissionsgesetzgebungen wie *ULEV50* oder auch *SULEV* erfüllen zu können. Ein Vorteil ergibt sich durch den Einsatz von *SCR*-Katalysatoren, diese sind heutzutage Massenprodukte für die Automobilindustrie, welche einen hohen Reifegrad erreicht haben und zudem auch zuverlässig sind. Dahingegen ist die Dauerhaltbarkeit des *ECATs* abhängig von den Betriebsbedingungen und ist daher schwierig zu bewerten. Für System1 mit der klassischen Anordnung der Komponenten gibt es einen wesentlichen Nachteil hinsichtlich des Warmlaufverhaltens, wenn ein im Unterflurbereich positioniertes *SCR*-System für eine *PKW*-Anwendung mit relativ niedriger spezifischen Last, wie im *FTP75*, eingesetzt wird. Hierfür ergibt sich ein Nachteil im Kraftstoffverbrauch hinsichtlich Warmlauf und Thermomanagement für das *SCR*-System. Das Ausmaß dieses erhöhten Kraftstoffverbrauchs ist von der Fahrzeug-Motor-Kombination, Struktur und Design des *EAS* und von der eingesetzten Betriebsstrategie abhängig.

Um strengeren Emissionsgesetzten wie *ULEV50* gerecht werden zu können muss für Konzept1 ein Mehrverbrauch in Kauf genommen werden. Daraus folgt, dass eine Senkung des Kraftstoffverbrauchs für strengere Gesetzgebungen mit dieser Konfiguration nicht möglich ist. Damit verbunden sind erhöhte Treibhausgase wie Kohlendioxid, Methan und Lachgas die aus den innermotorischen Heizmaßnahmen resultieren. Eine Reduktion dieser Treibhausgase kann nur über einen geringeren *SCR*-Heizbedarf erreicht werden. Für die Hardwareseite liegt das Potential in einer reduzierten Wärmekapazität, besseren Isolierung bzw. geringere Wärmeverluste und besserer Katalysatortechnik. Die Zielsetzung für *SCR*-Systeme liegt im Niedertemperaturbereich und in der geringeren *NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>*-Sensibilität.

Die Ergebnisse für das Abgasnachbehandlungssystem2 zeigen, dass ein gleiches Emissionsniveau (*ULEV50*) mit geringerem Mehrverbrauch, im Vergleich mit Konzept1, erreicht werden kann. Das Einhalten dieser Grenzwerte ist auch unter realen Fahrbedingungen ohne weiteres möglich, aufgrund des höheren Temperaturniveaus für das *SCR*-System. Zusätzlich ist ein hohes Potential für das Erfüllen der *SULEV*-Grenzwerte mit geringerem Mehrverbrauch vorhanden. Bezogen auf das Packaging ergibt sich die Möglichkeit das gesamte *EAS* in Motornähe unterzubringen. Aufgrund dessen wäre es im besten Fall möglich eine fahrzeugunabhängige Konfiguration einzusetzen, indem lediglich Betriebsstrategie und Kalibrierung auf den Fahrzeugtyp angepasst werden.

Mit der Verwendung eines sDPFs ergeben sich bestimmte Herausforderungen die berücksichtigt werden müssen. Ein wichtiger Punkt umfasst die Umwandlung des Harnstoffs in Ammoniak, weil dafür ein begrenzter Mischungsweg zwischen DOC und sDPF zur Verfügung steht. Zusätzlich muss die Maximaltemperatur für die SCR-Beschichtung des DPFs berücksichtigt werden. Das hat zur Folge, dass die DPF-Regeneration temperaturgeregelt ablaufen muss, daher ist es notwendig die genaue Ruß-Beladung und den damit verbundenen Regenerationsprozess zu kennen. Um eine ausreichend hohe NOx-Konvertierung auch bei hohen Raumgeschwindigkeiten erreichen zu können, muss im sDPF eine größere Menge der SCR-Beschichtung in den porösen Kanälen vorhanden sein.

Das Abgasnachbehandlungssystem<sup>3</sup> stellt eine Alternative zu System<sup>2</sup> dar, indem der ECAT durch einen DOC vor Turbine ersetzt wird. Der Einsatz des ECATs ist aufgrund des hohen elektrischen Leistungsbedarfs während der Kaltstartphase nicht für jedes Bord-Netz geeignet. Aufgrund des hohen Temperaturniveaus vor Turbinen-Eintritt ist ein früher NMHC-Umsatz durch den DOC möglich, infolge eines PTDOCs wird jedoch der Enthalpie-Strom für die Turbine verändert und damit der Ladedruckaufbau beeinflusst. Je nachdem wie der Kompromiss zwischen NMHC-Umsatz und Ladedruck getroffen wird, kann das SULEV-Emissionsniveau erreicht werden.

Aufgrund der Tatsache, dass ein Großteil der TP-NOx-Emissionen in der Kaltstartphase bis zum Anspringen des SCR-Systems entsteht, kann durch Einsatz eines LNTs statt des DOCs ein Vorteil erreicht werden. Mit LNT/SCR-Kombinationen kann eine Reduktion des Heizbedarfs erreicht werden, infolge dessen sinken die HC-Emissionen und der Mehrverbrauch. Nachteil dieser Variante liegt in den Kosten von LNT, SCR und der notwendigen Sensorik.

Eine kurze Zusammenfassung der drei Konzepte ist in Tab. 5-6 angegeben. Je nachdem in welchem Fahrzeug ein System eingesetzt werden soll, gibt es dafür bevorzugt Konfigurationen. Das System<sup>1</sup> empfiehlt sich für SUV-Anwendungen (Sport-Utility-Vehicle), da generell eine höhere Leistung gefordert ist und somit das Aufheizen und Thermomanagement des SCR-Systems unterstützt. Das System<sup>2</sup> und <sup>3</sup> unterstützt den Einsatz in Mittelklasse-Fahrzeugen, wegen der günstigeren Betriebsbedingungen des sDPFs. Der Einsatz solcher Systeme in Klein- und Kompaktwagen ist aufgrund der hohen Kosten derzeit schwierig zu definieren.

Konzepte	Vorteile	Nachteile
	<ul style="list-style-type: none"> <li>+einfacher Aufbau</li> <li>+SCR ist Standardprodukt</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>-Mehrverbrauch aufgrund Heizmaßnahmen</li> <li>-Dauerhaltbarkeit ECAT</li> </ul>
	<ul style="list-style-type: none"> <li>+Betriebsbedingungen sDPF</li> <li>+geringer Mehrverbrauch</li> <li>+kompakte Bauweise</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>-DPF-Regeneration, thermische Alterung</li> <li>-Dauerhaltbarkeit ECAT</li> <li>-NH3-Gleichverteilung</li> </ul>
	<ul style="list-style-type: none"> <li>+kein ECAT</li> <li>+geringer Mehrverbrauch</li> <li>+kompakte Bauweise</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>-DPF-Regeneration, thermische Alterung</li> <li>-Ladedruck</li> <li>-NH3-Gleichverteilung</li> </ul>

Tab. 5-6; Vor- und Nachteile der unterschiedlichen Abgasnachbehandlungssysteme



## 6 Zusammenfassung und Ausblick

### 6.1 Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden die Vorgehensweisen der Parametrierung von Abgasnachbehandlungsmodellen und der modellunterstützten Konzeptuntersuchung, sowie die möglicherweise auftretenden Schwierigkeiten behandelt. Es wurde erstmals eine derartige Prozedur mit den eingesetzten Simulationsmodellen durchgeführt, daher wurden im Laufe der Arbeit Schwachstellen aufgedeckt, die für ein effektives Arbeiten gelöst oder verbessert werden mussten.

Schwachstellen der Abgasnachbehandlungsmodelle:

- Vollständigkeit der berücksichtigten Reaktionen
- fehlende Transportlimitierungen
- numerische Instabilität bei zu kleiner Zeitschrittweite
- notwendige Anpassung der Parametrierung bei verändertem Zeitschritt
- Druck-Unabhängigkeit der Modelle

Schwachstellen Gesamtsystem Motor- und Abgasnachbehandlungsmodelle:

- numerische Instabilität durch die Verwendung unterschiedlicher Zeitschrittweiten (Motor-EAS)
- deutlich erhöhte Rechenzeit, Gesamtsystem ist nicht mehr echtzeitfähig

Generell bieten die Modelle eine gute Grundlage für eine Konzeptuntersuchung. Um höheren Anforderungen gerecht zu werden, müssen die Schwachstellen der Modelle beseitigt werden. Außerdem darf die Echtzeitfähigkeit der Modelle durch getroffene Maßnahmen nicht verloren gehen, da dies ein wesentlicher Vorteil der eingesetzten Methodik ist.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die hier gezeigte Vorgehensweise zur Modellanwendung Vorteile gegenüber der Prüfstands-Anwendung aufweist. Die modellunterstützte Untersuchung ist dafür prädestiniert das Potential bestimmter Systeme besser erfassen zu können, jedoch müssen die Simulationsergebnisse durch Messungen verifiziert werden damit Unsicherheiten ausgeschlossen werden können.

Mit dieser Methodik ist neben der schnellen Bewertung verschiedener Motor- und Abgasnachbehandlungssystem-Kombinationen eine Vor-Kalibrierung möglich. Für getroffene Entscheidungen müssen lediglich Verifizierungsmessungen am Prüfstand durchgeführt werden. Auf diese Weise sind aufwändige und teure Schleifen durch Hardware- und Parameteranpassung am Versuchsträger vermeidbar. Das bietet sich besonders für die Abgasgesetzgebungen wie ULEV50 oder SULEV an um diese mit geringem Aufwand und Kosten erreichen zu können. Es ist möglich bestimmte Sensibilitäten und Anforderungen des Abgasnachbehandlungssystems aufzudecken und die Betriebsweise des Motors darauf anzupassen.

## 6.2 Ausblick

Mit dieser Arbeit wird gezeigt, dass eine modellunterstützten Konzeptbewertung und –Optimierung möglich ist. Aufgrund der Schwachstellen in den Abgasnachbehandlungsmodelle und der Gesamtsystemsimulation war die Arbeitsweise nur unter erschwerten Bedingungen möglich. Allerdings wird das Potential dieser Methodik hinsichtlich Aufwands- und Kosteneinsparung ersichtlich. Um ein effektives Arbeiten mit den Modellen sicherstellen zu können, müssen die Schwachstellen gelöst oder verbessert werden.

Die Simulationsmodelle können dabei in unterschiedlichen Bereichen der Motoren- und Abgasnachbehandlungs-Entwicklung eingesetzt werden, wie z.B. für die:

- Konzeptuntersuchung; bestehender oder alternativer Systeme
- Betriebsstrategie; inklusive Thermomanagementmaßnahmen
- Vor-Kalibrierung, Kennfeldbedatung
- ECU-Funktionsentwicklung, Programmierung und Kalibrierung von Funktionen.

Hiermit steht der Forschung und Entwicklung ein hilfreiches Werkzeug zur Verfügung um mit komplexen Systemen, wie z.B. Hybrid-Systeme, zukünftige Emissionsgrenzwerte erreichen zu können.

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 2-1; Rußbildung und -oxidation bei der dieselmotorischen Verbrennung [6] .....	- 4 -
Abb. 2-2; Schadstoffbildung im Dieselmotor über Luftverhältnis [6] .....	- 4 -
Abb. 2-3; Rohemissionen Diesel (links) und Rohemissionen Otto homogen (rechts) [17] .....	- 5 -
Abb. 2-4; Vergleich $CO_2$ -Emissionen verschiedener Antriebskonzepte [20] .....	- 6 -
Abb. 2-5; Abscheidevermögen der menschlichen Atmungsorgane [20] .....	- 8 -
Abb. 2-6; Aktivierungsenergie mit und ohne Katalysator .....	- 11 -
Abb. 2-7; Aufbau eines Abgaskatalysators [26] .....	- 12 -
Abb. 2-8; Schematische Darstellung der ablaufenden Schritte einer heterogenen Katalyse [11] .....	- 13 -
Abb. 2-9; Umsetzungsraten limitiert durch Kinetik, Poren- und Wandfilmdiffusion-schematisch.....	- 14 -
Abb. 2-10; Funktionsweise Partikelfilter [Mercedes] .....	- 15 -
Abb. 2-11; Konvertierung der Schadstoffe für Otto-Motoren aufgetragen über das Luftverhältnis[14].....	- 16 -
Abb. 2-12; $NO_2$ -Anteil eines Pt-DOC mit zugeführten Gas von 270ppm $NO$ , 6% $O_2$ und 10% $N_2$ [21] .....	- 18 -
Abb. 2-13; $NO_2$ -Reduzierung/-Bildung während light-off [21] .....	- 19 -
Abb. 2-14; $NO_x$ -Umsatz in Abhängigkeit der Temperatur für einen SCR-Katalysator [20] .....	- 21 -
Abb. 3-1; AVL Standard Motorenprüfstand [5] .....	- 28 -
Abb. 4-1; Messung DOC US/DWN Temperatur, $NMHC$ , $CO$ , $NO$ und $NO_2$ .....	- 35 -
Abb. 4-2; Testfall Variation des Wärmedurchgangskoeffizienten.....	- 38 -
Abb. 4-3; $NMHC$ -Konzentrationen Messungs-/Rechnungsvergleich für den DOC, mit Ausgangsbasis .....	- 40 -
Abb. 4-4; $CO$ -Konzentrationen Messungs-/Rechnungsvergleich für den DOC, mit Ausgangsbasis ....	- 40 -
Abb. 4-5; Temperaturspuren US/DWN_DOC und Exotherme–numerische Instabilität 2 Hz DOC- Modell .....	- 41 -
Abb. 4-6; $NMHC$ -Konzentrationen Messungs-/Rechnungsvergleich, DOC-Modell mit Speicherfähigkeit.....	- 42 -
Abb. 4-7; DOC-Modell, Ausgangsbasis > Letztstand .....	- 42 -
Abb. 4-8; Temperaturspuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den DOC .....	- 44 -
Abb. 4-9; $CO$ -Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den DOC .....	- 45 -
Abb. 4-10; $NMHC$ -Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den DOC .....	- 45 -
Abb. 4-11; $NO$ -, $NO_2$ - und $NO_x$ -Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den DOC .....	- 46 -
Abb. 4-12; Temperaturspuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den ECAT .....	- 47 -
Abb. 4-13; $CO$ -Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den ECAT .....	- 48 -
Abb. 4-14; $NMHC$ -Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den ECAT .....	- 48 -
Abb. 4-15; $NO$ -, $NO_2$ - und $NO_x$ -Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den ECAT .....	- 49 -
Abb. 4-16; Druckverlust cDPF, unbeladen (links) und beladen (ca. 3g/Liter, rechts), Messung vs. Rechnung.....	- 50 -
Abb. 4-17; Temperaturspuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den cDPF.....	- 51 -
Abb. 4-18; $CO$ -Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den cDPF.....	- 51 -
Abb. 4-19; $NMHC$ -Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den cDPF.....	- 52 -
Abb. 4-20; $NO$ -, $NO_2$ - und $NO_x$ -Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den cDPF .....	- 52 -
Abb. 4-21; Druck Messungs-/Rechnungsvergleich vor und nach cDPF.....	- 53 -
Abb. 4-22; Temperatur/ $NO/NO_2/NO_x/NH_3$ Messungs-/Rechnungsvergleich für den SCR, 200°C ...	- 55 -

Abb. 4-23; Temperatur/ <i>NO/NO2/NOx/NH3</i> Messungs-/Rechnungsvergleich für den SCR, 300°C ...	- 55 -
Abb. 4-24; Temperaturspuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den SCR .....	- 55 -
Abb. 4-25; <i>NH3</i> -, <i>NO</i> -, <i>NO2</i> -, <i>NOx</i> - und <i>N2O</i> -Spuren Messungs-/Rechnungsvergleich für den SCR .....	- 56 -
Abb. 4-26; Druckverlust sDPF, unbeladen (links) und beladen (ca. 3g/Liter, rechts), Messung vs. Rechnung.....	- 57 -
Abb. 4-27; Temperatur/ <i>NO/NO2/NOx/NH3</i> Messungs-/Rechnungsvergleich für den sDPF, 200°C..	- 58 -
Abb. 4-28; Temperatur/ <i>NO/NO2/NOx/NH3</i> Messungs-/Rechnungsvergleich für den sDPF, 350°C.	- 58 -
Abb. 5-1; Struktur des MoBEO-Modells für den Motor I5D .....	- 61 -
Abb. 5-2; Temperaturschwellen für EOM1 und EOM2 .....	- 62 -
Abb. 5-3; Hysterese-Schaltung für EOM2.....	- 62 -
Abb. 5-4; Prinzipieller <i>HC</i> -, <i>CO</i> -Umsatz und <i>NO2</i> -Bildung in einem DOC.....	- 63 -
Abb. 5-5; <i>NOx</i> -Konvertierung eines SCR-Systems, abhängig der Temperatur in einem FTP72 .....	- 64 -
Abb. 5-6; Prinzipdarstellung Abgasnachbehandlungssystem1 .....	- 65 -
Abb. 5-7; Zyklusergebnisse System1 für FTP75 mit 4"DOC.....	- 66 -
Abb. 5-8; <i>NOx</i> -Konvertierung im FTP75 für System1 mit 4"DOC .....	- 67 -
Abb. 5-9; Vergleich <i>NMHC</i> -Emissionen vor und nach ECAT .....	- 68 -
Abb. 5-10; <i>NMHC</i> -Umsatz von DPF bei erhöhter Temperatur .....	- 68 -
Abb. 5-11; <i>NMHC</i> -Emissionen EO/TP im Vergleich von "RHU und ECAT" zu "nur ECAT" .....	- 69 -
Abb. 5-12; <i>NO2</i> -Emissionen im FTP75 über System1 .....	- 70 -
Abb. 5-13; <i>NO2/NOx</i> -Verhältnis im FTP75 über System1.....	- 70 -
Abb. 5-14; <i>NMHC</i> -Konvertierung im FTP75 für 4" vs. 6"DOC .....	- 71 -
Abb. 5-15; <i>NO2/NOx</i> -Verhältnis im FTP75 für 4" vs. 6"DOC .....	- 72 -
Abb. 5-16; Auswirkung der größeren thermischen Masse auf SCR-Temperaturen .....	- 72 -
Abb. 5-17; Kumulierte EO- und TP- <i>NOx</i> -Emissionen 4"DOC vs. 6"DOC.....	- 73 -
Abb. 5-18; <i>NMHC</i> -Konvertierung im FTP75, 4"DOC vs. 6" DOC vs. 6"DOC+50% .....	- 74 -
Abb. 5-19; <i>NO2/NOx</i> -Verhältnis im FTP75, 4" vs. 6"DOC vs. 6"DOC+50% .....	- 74 -
Abb. 5-20; <i>NMHC</i> -Emissionen im FTP75 über System1 .....	- 75 -
Abb. 5-21; <i>NO2/NOx</i> -Verhältnis im FTP75 über System1.....	- 75 -
Abb. 5-22; Zyklusergebnisse System1 für FTP75 mit 6"DOC+50% vs. 6"DOC+50% optimiert .....	- 77 -
Abb. 5-23; <i>NOx</i> -Konvertierung SCR und SCR+50% für unterschiedliche <i>NO2/NOx</i> -Verhältnisse... -	78 -
Abb. 5-24; Zyklusergebnisse System1 für FTP75 mit 6"DOC+50%, optimiert, 6"DFP und SCR+50% .....	- 79 -
Abb. 5-25; Prinzipdarstellung Abgasnachbehandlungssystem2 .....	- 80 -
Abb. 5-26; Zyklusergebnisse System2 für FTP75 mit 4"DOC.....	- 81 -
Abb. 5-27; <i>NMHC</i> -Verteilung im FTP75 über System1 und System2.....	- 82 -
Abb. 5-28; <i>NOx</i> -Konvertierung im FTP75 System2 mit 4"DOC .....	- 83 -
Abb. 5-29; <i>NOx</i> -Konvertierung im FTP75 durch sDPF und SCR in unterschiedlichen Versuchen.... -	83 -
Abb. 5-30; <i>NOx</i> -Umsatz in den ersten 600 Sekunden des FTP75 für den „RHU ECAT“-Versuch.... -	84 -
Abb. 5-31; <i>NO2/NOx</i> -Verhältnis im FTP75 über System2 für Ausgangsbasis .....	- 85 -
Abb. 5-32; <i>NMHC</i> -Konvertierung in „RHU ECAT“-Versuch für 4"DOC/6"DOC/6"DOC+50%..... -	86 -
Abb. 5-33; kumuliert EO/TP- <i>NMHC</i> -Emissionen für „RHU ECAT Basis“-Versuch.....	- 86 -
Abb. 5-34; <i>NOx</i> -Verlauf für "RHU ECAT"-Versuch mit 6"DOC.....	- 87 -
Abb. 5-35; <i>NOx</i> -Konvertierung in „RHU ECAT“-Versuch für 4"DOC vs. 6"DOC vs. 6"DOC+50% .....	- 87 -

Abb. 5-36; Temperaturspuren DOC upstream und downstream, 4"DOC vs. 6"DOC .....	- 88 -
Abb. 5-37; Gegenüberstellung $NO_x$ -Emissionen von "RHU ECAT Basis", "RHU ECAT ½ POI_L" und "RHU ECAT ½ POI_L 100sec kein RHU" .....	- 89 -
Abb. 5-38; Gegenüberstellung $NMHC$ -Emissionen von "RHU ECAT Basis", "RHU ECAT ½ POI_L" und "RHU ECAT ½ POI_L 100sec kein RHU" .....	- 89 -
Abb. 5-39; Kumulierte EO-/TP- $NMHC$ -Emissionen „RHU ECAT Basis“ vs. „RHU ECAT 365“ ....	- 92 -
Abb. 5-40; Kumulierte EO-/TP- $NO_x$ -Emissionen „RHU ECAT Basis“ vs. „RHU ECAT 365“ .....	- 92 -
Abb. 5-41; Zyklusergebnis System2 für FTP75 6"DOC+50% optimierte RHU-Funktionen .....	- 93 -
Abb. 5-42; Prinzipdarstellung Abgasnachbehandlungssystem3 .....	- 94 -
Abb. 5-43; Ausschnitt FTP75 Temperatur/Ladedruck vor und nach PTDOC .....	- 96 -
Abb. 5-44; Ausschnitt FTP75 kumulierte $CO$ -/ $NMHC$ -Emissionen vor und nach PTDOC .....	- 96 -
Abb. 5-45; Zyklusergebnisse System3 für FTP75 mit 6"DOC+50% .....	- 97 -
Abb. 5-46; $NO_x$ -Konvertierung im FTP75 für System3 mit Basiseinstellungen und 6"DOC+50% ...	- 98 -
Abb. 5-47; TP- $NMHC$ -Emissionen während den ersten 600 Sekunden des FTP75 .....	- 99 -
Abb. 5-48; EO-/TP- $NMHC$ -Emissionen in ppm/g/h und kumuliert in g .....	- 99 -
Abb. 5-49; $NMHC$ -Emissionen EO/TP in ppm, Temperatur DO-Eintritt und Abgasmassenstrom...	- 100 -
Abb. 5-50; Ergebnisse aus RHU-Variation für System3 .....	- 101 -
Abb. 5-51; Kumulierte EO-/TP- $NMHC$ -Emissionen „RHU Basis“ vs. „S3_9“ .....	- 102 -
Abb. 5-52; Kumulierte EO/TP- $NO_x$ -Emissionen „RHU Basis“ vs. „S3_9“ .....	- 102 -
Abb. 5-53; Zyklusergebnisse System3 für FTP75 min 6"DOC+50% optimierte RHU-Funktionen .	- 103 -
Abb. 5-54; Ursprung der TP- $NO_x$ -Emissionen, gezeigt in den ersten 800 Sekunden des FTP75 .....	- 104 -
Abb. 5-55; Zyklusergebnisse System3 für FTP75 mit "Ausgangsbasis" vs. "Optimiert" .....	- 104 -
Abb. 0-1; PKW-Abgastestzyklen für EU, US und Japan [17] .....	- 115 -
Abb. 0-2; Charakterisierungsmessungen SCR-Katalysator für 200°C, $\alpha$ =konstant. Dargestellt sind $NO_x/NH_3$ am Eintritt, konvertierte $NO_x$ , Bilanz $NH_3+NO_x$ am Austritt und eingespeicherte $NH_3$ Menge .....	- 116 -
Abb. 0-3; Charakterisierungsmessungen sDPF für 200°C, $\alpha \neq$ konstant. Dargestellt sind $NO_x/NH_3$ am Eintritt, konvertierte $NO_x$ , Bilanz $NH_3+NO_x$ am Austritt und eingespeicherte $NH_3$ Menge .....	- 116 -
Abb. 0-4; Validierung System1, Temperaturen vor und nach ECAT .....	- 117 -
Abb. 0-5; Validierung System1, $CO$ -, $NMHC$ - und $NO_x$ -Konzentrationen vor und nach ECAT .....	- 117 -
Abb. 0-6; Validierung System1, Temperaturen vor und nach DOC .....	- 118 -
Abb. 0-7; Validierung System1, $CO$ -, $NMHC$ - und $NO_x$ -Konzentrationen vor und nach DOC .....	- 118 -
Abb. 0-8; Validierung System1, Temperaturen vor und nach DPF .....	- 119 -
Abb. 0-9; Validierung System1, $CO$ -, $NMHC$ - und $NO_x$ -Konzentrationen vor und nach DPF .....	- 119 -
Abb. 0-10; Validierung System1, Temperaturen vor und nach SCR .....	- 120 -
Abb. 0-11; Validierung System1, $CO$ -, $NMHC$ - und $NO_x$ -Konzentrationen vor und nach SCR .....	- 120 -
Abb. 0-12; Kumulierte $CO$ -/ $NMHC$ - und $NO_x$ -Emissionen .....	- 121 -
Abb. 0-13; Zyklusergebnisse System1 für FTP75 mit 6"DOC .....	- 122 -
Abb. 0-14; Zyklusergebnisse System1 für FTP75 mit 6"DOC+50% .....	- 122 -
Abb. 0-15; Zyklusergebnisse System1 für FTP75 mit 6"DOC+50% parameteroptimiert .....	- 123 -
Abb. 0-16; Zyklusergebnisse System2 für FTP75 mit 6"DOC .....	- 123 -
Abb. 0-17; Zyklusergebnisse System2 für FTP75 mit 6"DOC+50% .....	- 124 -
Abb. 0-18; Vergleich Zyklusergebnisse System2 6"DOC +50% mit 6"DOC+50% beste Variation	- 124 -

## Tabellenverzeichnis

Tab. 2-1; EU-Abgasgrenzwerte für die PKW-Anwendung .....	- 9 -
Tab. 2-2; Nordamerikanische Abgasgrenzwerte Tier2 für die PKW-Anwendung .....	- 9 -
Tab. 2-3; Kalifornischen Abgasgrenzwerte LEVII für die PKW-Anwendung.....	- 10 -
Tab. 3-1; Informationen und Kenndaten des Versuchsmotors.....	- 29 -
Tab. 3-2; Daten zum ECAT .....	- 29 -
Tab. 3-3; Daten zum DOC .....	- 30 -
Tab. 3-4; Daten zum cDPF .....	- 30 -
Tab. 3-5; Daten zum sDPF.....	- 30 -
Tab. 3-6; Daten zum SCR .....	- 31 -
Tab. 4-1; FTP72, Messungen für DOC.....	- 34 -
Tab. 4-2; Eingabefeld der Geometrieparameter für das DOC-Modell.....	- 36 -
Tab. 4-3; Materialparameter für das DOC-Modell .....	- 37 -
Tab. 4-4; DOC-Kinetik-Parameter für Basis-Simulationsmodell .....	- 37 -
Tab. 4-5; Wertebereich der DOC-Parametrierung .....	- 46 -
Tab. 4-6; Wertebereich der ECAT-Parametrierung .....	- 49 -
Tab. 4-7; Wertebereich der cDPF-Parametrierung .....	- 53 -
Tab. 4-8; Wertebereich der SCR-Parametrierung.....	- 56 -
Tab. 4-9; Wertebereich der sDPF-Parametrierung.....	- 58 -
Tab. 5-1; Durchgeführte Variationsrechnungen für System1 .....	- 66 -
Tab. 5-2; Durchgeführte Variationsrechnungen für System2 .....	- 81 -
Tab. 5-3; RHU-Variation für System2.....	- 91 -
Tab. 5-4; Durchgeführte Variationsrechnungen für System3 .....	- 95 -
Tab. 5-5; RHU-Variationen für System3 .....	- 101 -
Tab. 5-6; Vor- und Nachteile der unterschiedlichen Abgasnachbehandlungssysteme .....	- 106 -

## Literaturverzeichnis

- [1] AVL List GmbH: AVL BOOST Aftertreatment, Edition 11.2010
- [2] AVL List GmbH: Emission Bench CEBII User's Guide 04.2003
- [3] AVL List GmbH: SESAM FTIR User's Guide 11.2007
- [4] Balle, P.: Selektive katalysierte Reduktion von NO<sub>x</sub> mittels NH<sub>3</sub> an Fe-modifizierten BEA-Zeolithen, Dissertation, KIT Scientific Publishing Baden-Württemberg, ISBN 9783866447066, 2011
- [5] Denger, D.; Hochmann, G.; Schmidt, M.; Hollerer, P.; Zehetner, J.; Ebner, P.: Effiziente Konzept Evaluierung und Fahrzeug-Variantenkalibration am Motorprüfstand, AVL List GmbH, 2010
- [6] Eichlseder, H.: Verbrennungskraftmaschinen Vertiefte Ausbildung. Vorlesungsskriptum, Technische Universität Graz, 2010
- [7] Feßler, Dirk K.: Modellbasierte On-Board-Diagnoseverfahren für Drei-Wege-Katalysatoren, KIT Scientific Publishing Baden-Württemberg, ISBN 9783866445932, 2011
- [8] Fritz, M.: Absorption von Stickstoffoxiden mit chemischer Reaktion, VDM Verlag Dr. Müller, ISBN 3639317211, 2011
- [9] Gandhi, H.S.; Theis, J.R.; Ford Motor Company, Dearborn: Einsatzpotential von SCR Technologie für Benzin Direkteinspritzer Motoren, 29. Internationales Wiener Motorensymposium 25.04.2008
- [10] Hagelücken, C.: Autoabgaskatalysatoren, Grundlagen-Herstellung-Entwicklung-Recycling-Ökologie, 2. Auflage, Expert Verlag, Renningen, ISBN 3816924883, 2005.
- [11] Joos, F.: Technische Verbrennung, Verbrennungstechnik, Verbrennungsmodellierung, Emissionen, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, ISBN 3540343334, 2006
- [12] Klell, M.: Höhere Thermodynamik. Vorlesungsskriptum, Technische Universität Graz, 2011
- [13] Koebel, M.; Elsener, M.; Madla, G.: NO<sub>x</sub>-Verminderung in Dieselabgasen mit Harnstoff-SCR bei tiefen Temperaturen, in MTZ 62 (2001)2
- [14] Koop, J.: Detaillierte Modellierung der Pt-katalysierten Schadstoffminderung in Abgasen moderner Verbrennungsmotoren, Dissertation, Fakultät für Chemieingenieurwesen und Verfahrenstechnik, Universität Karlsruhe (TH), 2006
- [15] Mercedes-Benz: Abgas-Emissionen PKW, Grenzwerte, Vorschriften und Messung der Abgas-Emissionen sowie Berechnung des Kraftstoffverbrauchs aus dem Abgastest, 04.2001
- [16] Mladenov, N.: Modellierung von Autoabgaskatalysatoren, KIT Scientific Publishing Baden-Württemberg, ISBN 9783866444836, 2010
- [17] Mollenhauer, K.; Tschöke, H.: Handbuch Dieselmotoren (VDI-Buch), 3. Auflage, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, ISBN 3540721649, 2007
- [18] Rieberer, R.; Griendl, L.; Hauth, M.; Kienberger, T.; Moser, H.: Energie- und umwelttechn. Mess- und Versuchswesen. Vorlesungsskriptum, Technische Universität Graz, 2011
- [19] Ronald M. Heck; Robert J. Farrauto; Suresh T. Gulati: Catalytic air pollution control Commercial Technology, 3. Auflage, John Wiley & Sons Verlag Ney York City, ISBN 9780470275030, 2009
- [20] Sams, T.; Hausberger, S.; Schüssler M.: Schadstoffbildung und Emissionsminimierung. Vorlesungsskriptum, Technische Universität Graz, 2011

- [21] Spurr, P. C.; Franz, S.; Schütze, F.-W.; Noack, H.-D.; Müller W.: Die NO<sub>2</sub>-Bildung am DOC/DPF-System–Eine Systemanalyse, Umicore AG & Co KG, Hanau, 6. Internationales Forum Abgas- und Partike-Emissionen 10.03.2010
- [22] Werner, R.; Zellbeck, H.; Augsburg, K.; Horn, R.; Brück, R.; Kröger, S.; Zaldua, N.: Ein Vollkatalysatorsystem vor Abgasturbolader; Auslegung, Berechnung und Untersuchungen am Motorprüfstand, 14. Aufladetechnische Konferenz 25.09.2009
- [23] Wimmer, A.: Motorenmesstechnik. Vorlesungsskriptum, Technische Universität Graz, 2010
- [24] Wolf, M.: Simulation der katalytischen Methangaskonversion an Platin, Dissertation, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2000

**Internet**

- [25] ECOpoint: Emission Standards, in [www.dieselnet.com](http://www.dieselnet.com), Stand: 05.05.2012, URL: <http://www.dieselnet.com/standards> (letzter Aufruf: 10.07.2012)
- [26] Hamburger Verkehrsverbund: Betriebstemperatur, In: [www.hvv-mobility.com](http://www.hvv-mobility.com), Stand: 07.06.2012, URL: [http://www.hvv-mobility.com/upload/redaktion/03\\_G\\_betriebsTemp.jpg](http://www.hvv-mobility.com/upload/redaktion/03_G_betriebsTemp.jpg) (letzter Aufruf: 10.07.2012)



Anhang

a. Eingesetzte Testzyklen in EU, USA und Japan

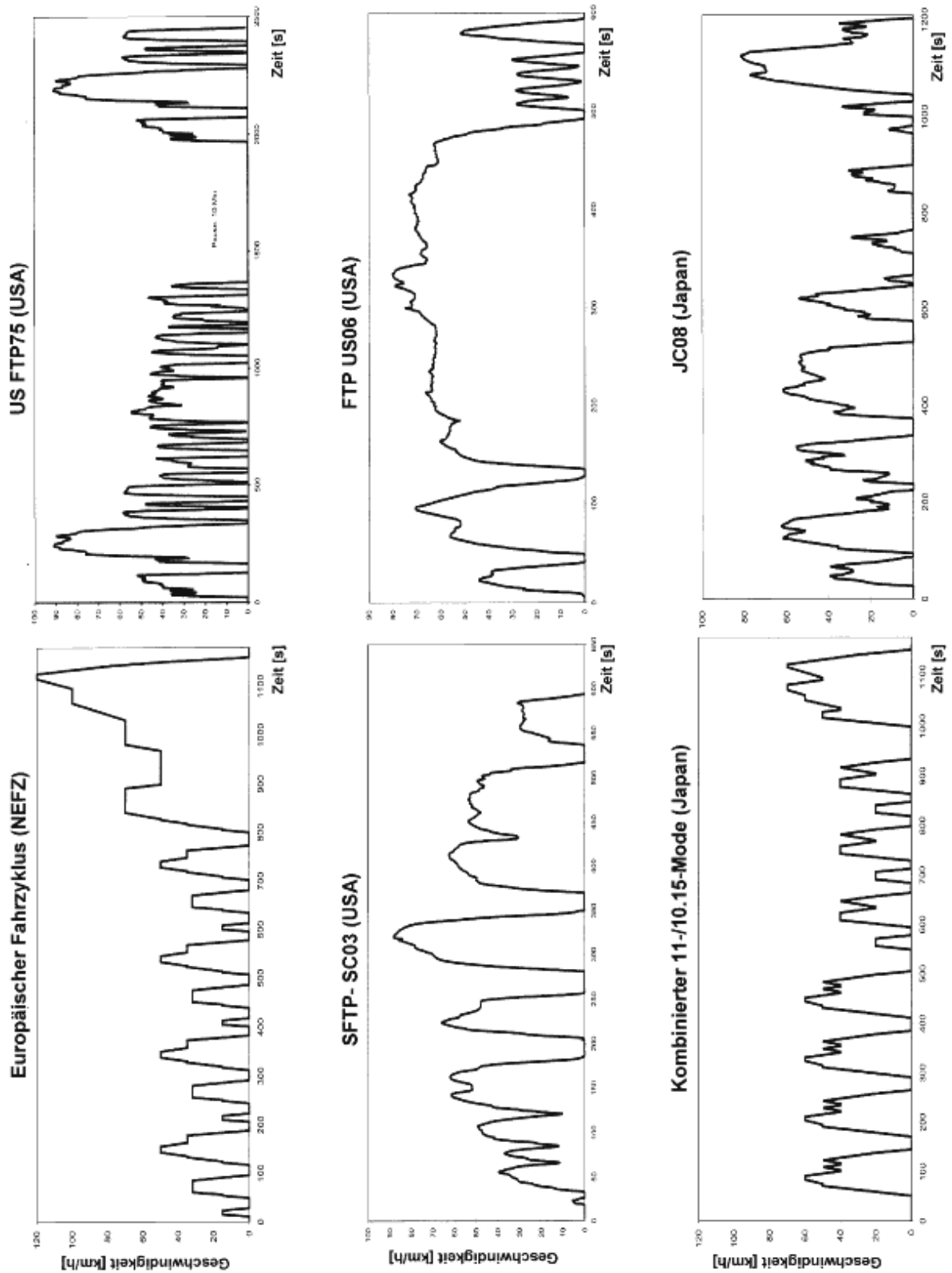
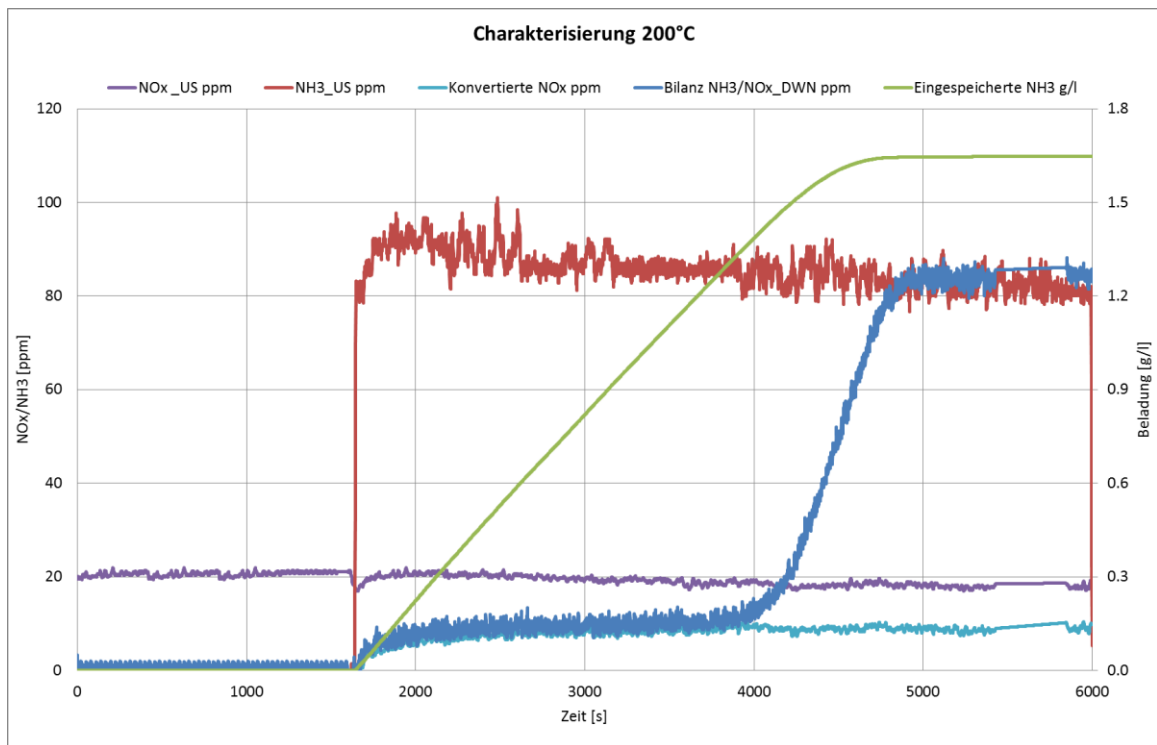
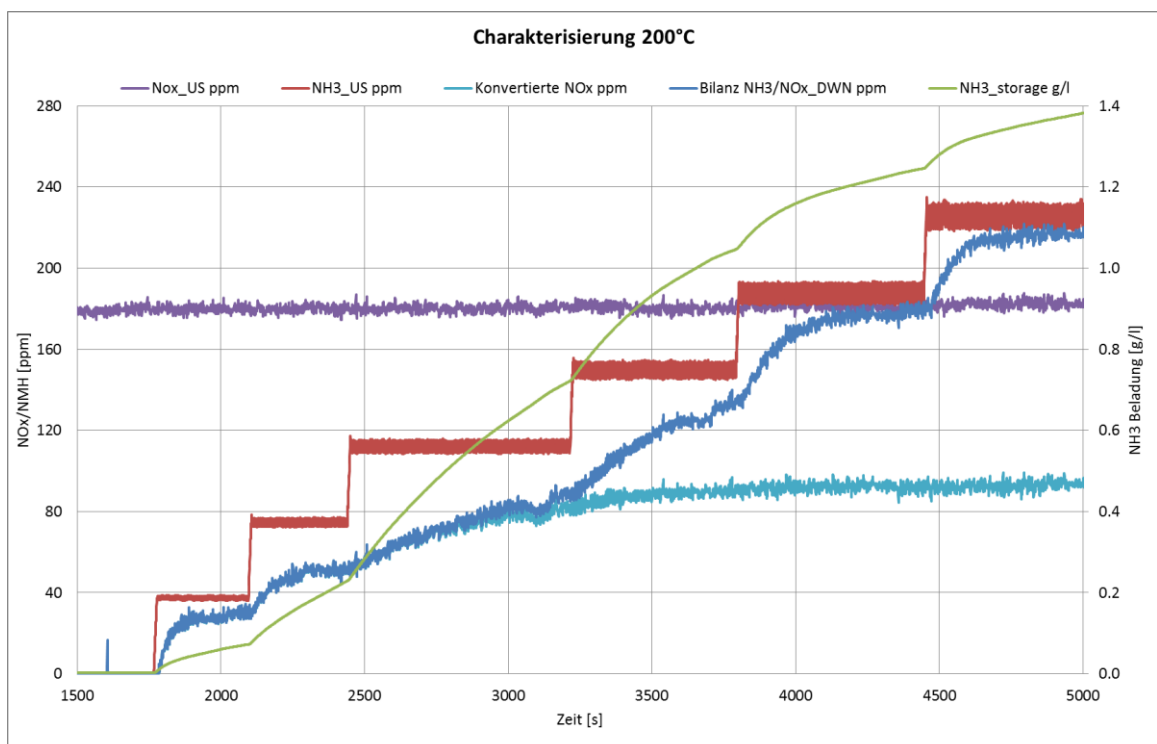


Abb. 0-1; PKW-Abgastestzyklen für EU, US und Japan [17]

## b. Charakterisierungsmessungen SCR und sDPF



**Abb. 0-2;** Charakterisierungsmessungen SCR-Katalysator für 200°C,  $\alpha$ =konstant. Dargestellt sind  $NO_x/NH_3$  am Eintritt, konvertierte  $NO_x$ , Bilanz  $NH_3+NO_x$  am Austritt und eingespeicherte  $NH_3$  Menge



**Abb. 0-3;** Charakterisierungsmessungen sDPF für 200°C,  $\alpha \neq$ konstant. Dargestellt sind  $NO_x/NH_3$  am Eintritt, konvertierte  $NO_x$ , Bilanz  $NH_3+NO_x$  am Austritt und eingespeicherte  $NH_3$  Menge

### c. Validierung Abgasnachbehandlungssystem1

Bei diesem FTP72 wurden Emissionen EO mit der CEB gemessen und Emissionen nach DPF mit dem FTIR. Aufgrund der geringen Temperaturen vor SCR Eintritt wurde kein AdBlue dosiert. In der Simulation wurde die AdBlue Dosierung + Vorladung des SCR mit  $NH_3$  verwirklicht.

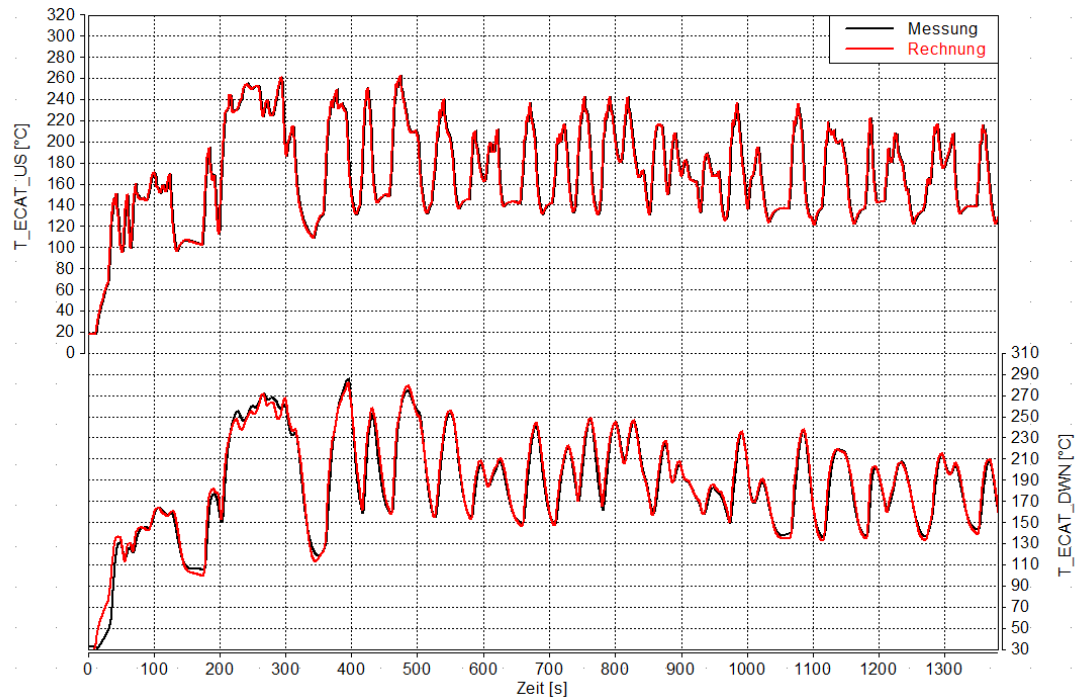


Abb. 0-4; Validierung System1, Temperaturen vor und nach ECAT

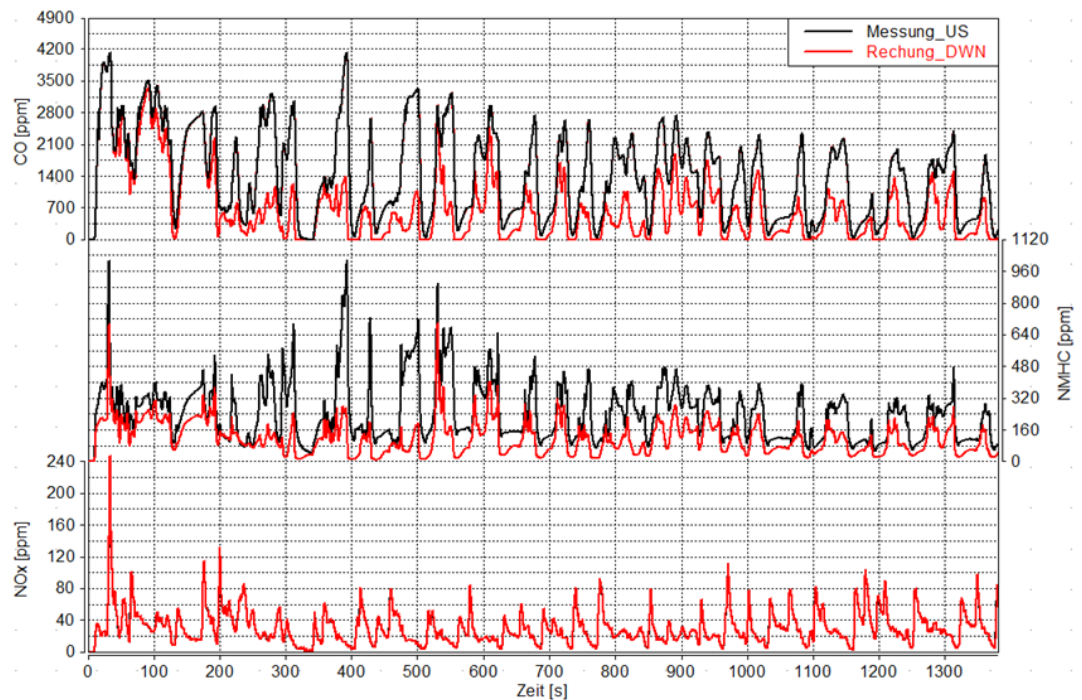


Abb. 0-5; Validierung System1,  $CO$ -,  $NMHC$ - und  $NO_x$ -Konzentrationen vor und nach ECAT

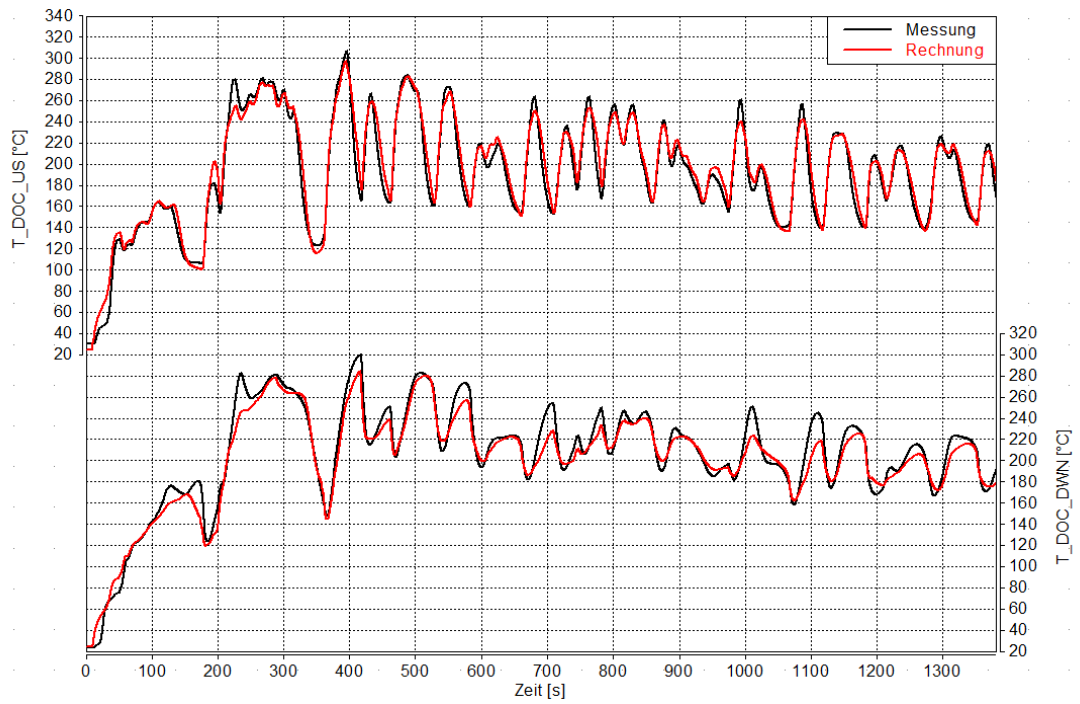


Abb. 0-6; Validierung System1, Temperaturen vor und nach DOC

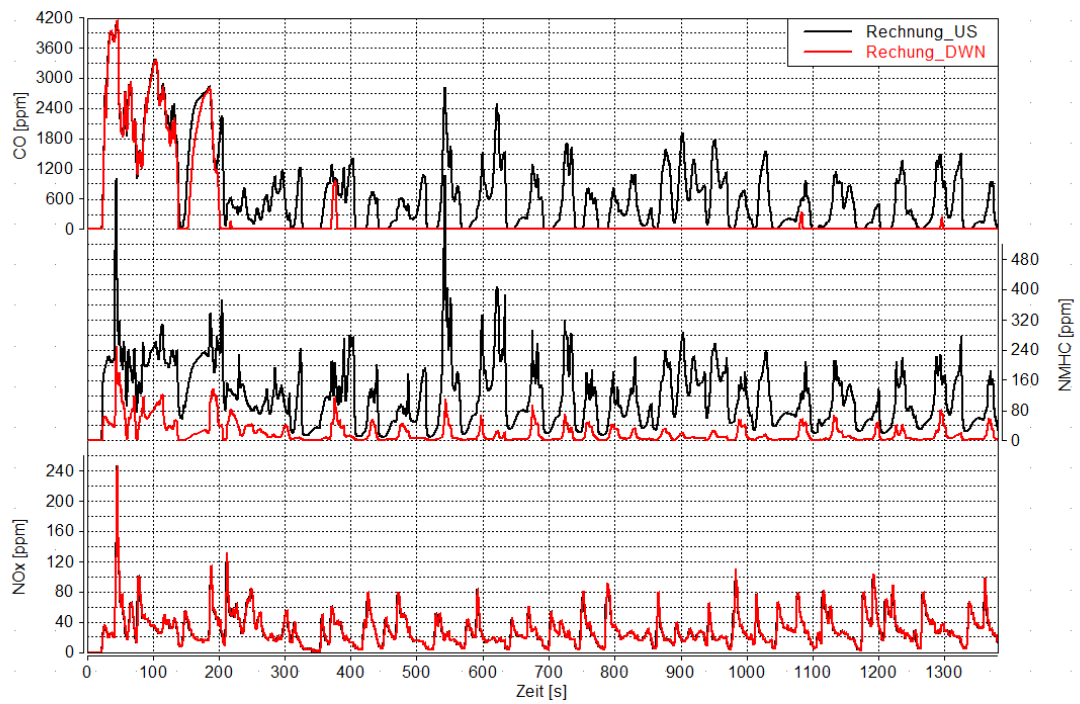


Abb. 0-7; Validierung System1, CO-, NMHC- und NO<sub>x</sub>-Konzentrationen vor und nach DOC

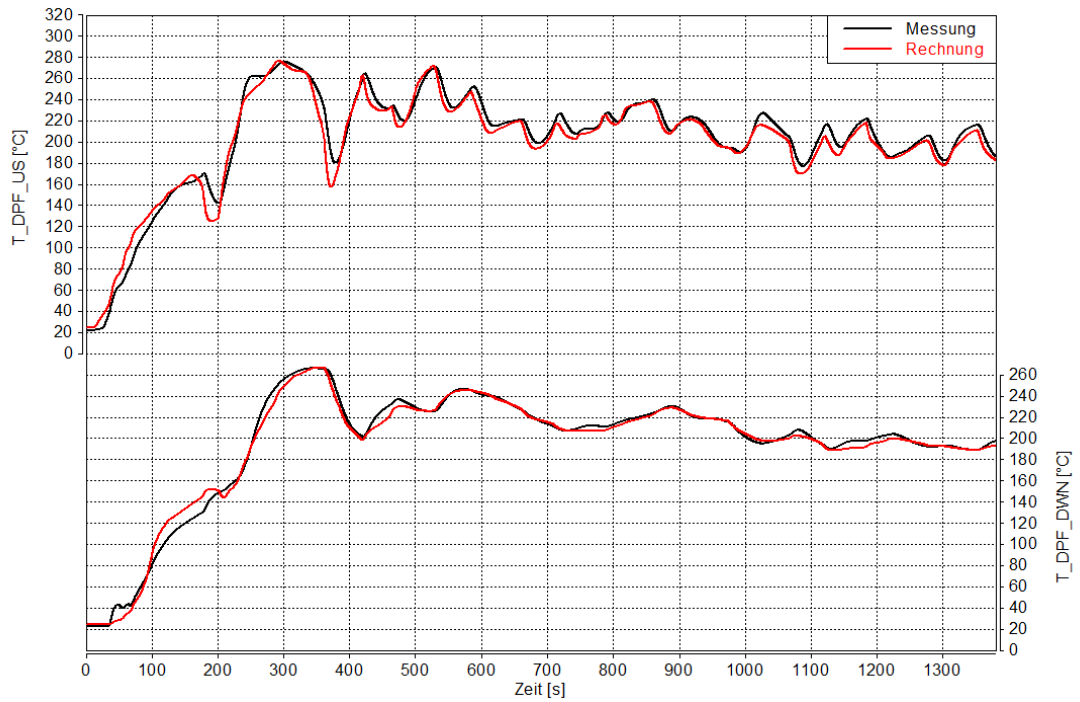


Abb. 0-8; Validierung System1, Temperaturen vor und nach DPF

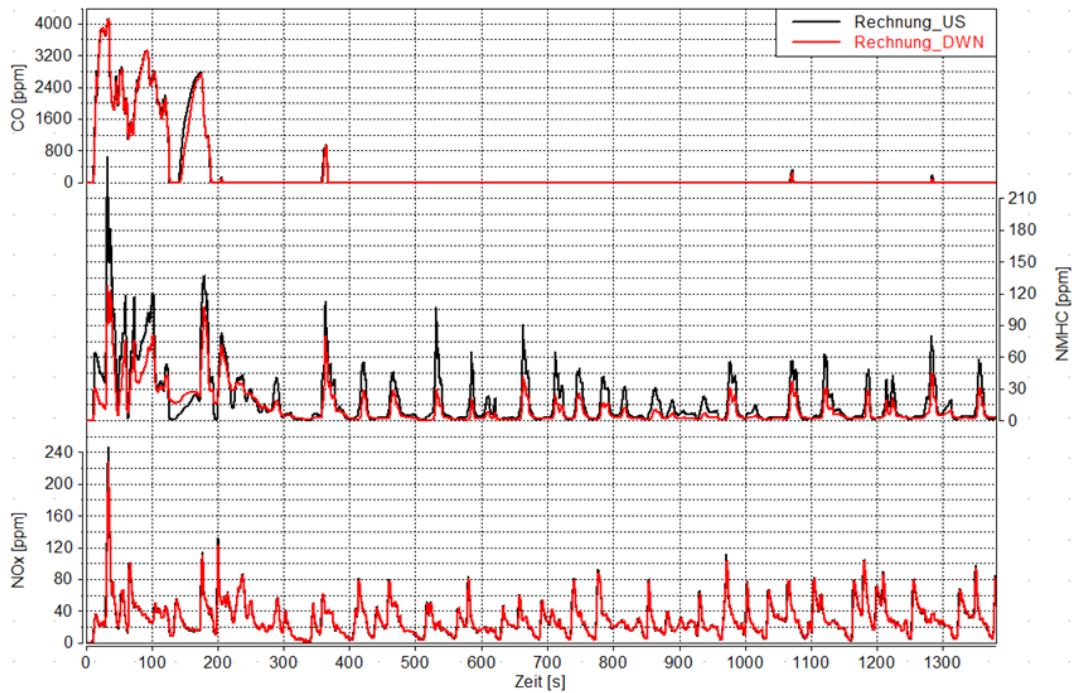


Abb. 0-9; Validierung System1, CO-, NMHC- und NOx-Konzentrationen vor und nach DPF

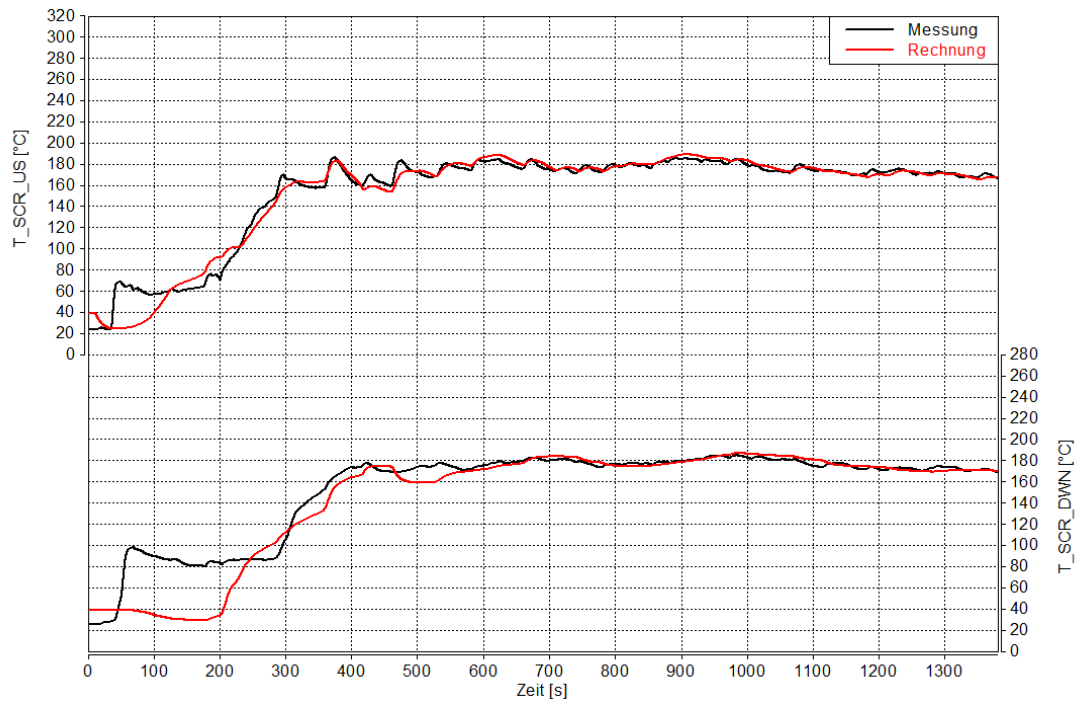


Abb. 0-10; Validierung System1, Temperaturen vor und nach SCR

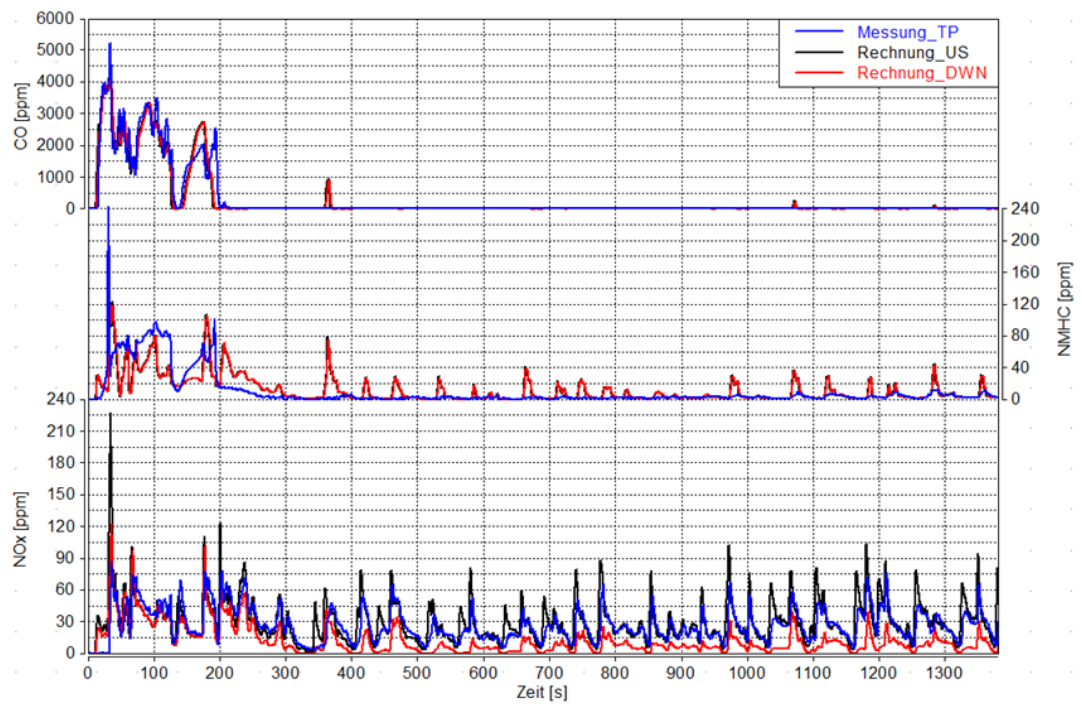


Abb. 0-11; Validierung System1, CO-, NMHC- und NOx-Konzentrationen vor und nach SCR



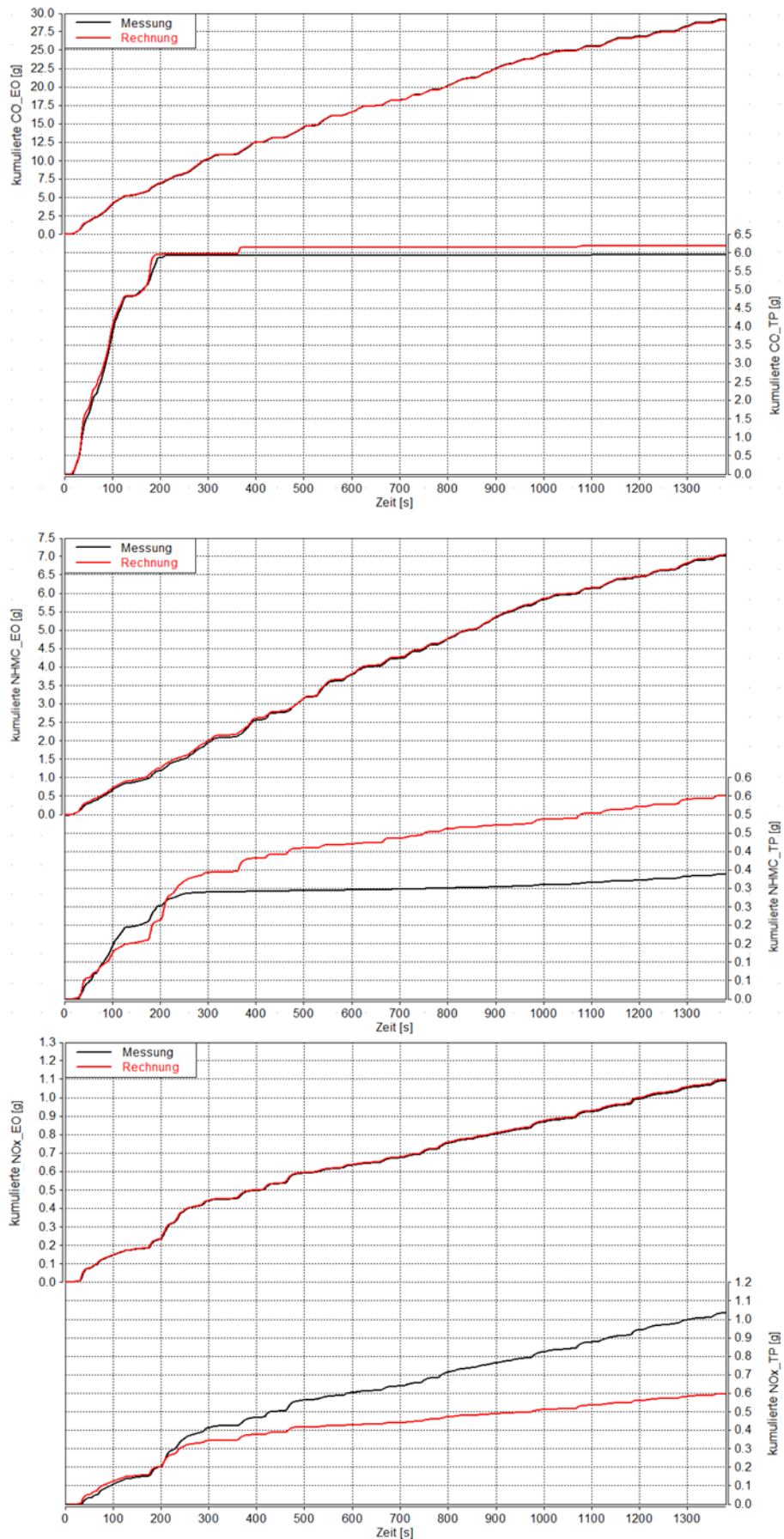


Abb. 0-12; Kumulierte CO-/NMHC- und NOx-Emissionen

d. Zyklusergebnisse Abgasnachbehandlungssystem1

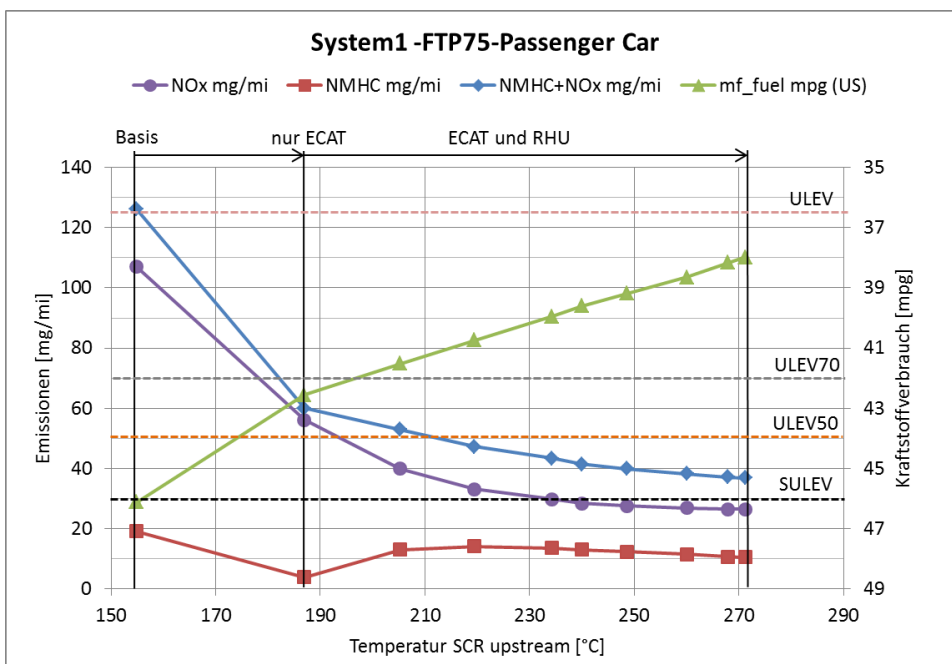


Abb. 0-13; Zyklusergebnisse System1 für FTP75 mit 6“DOC

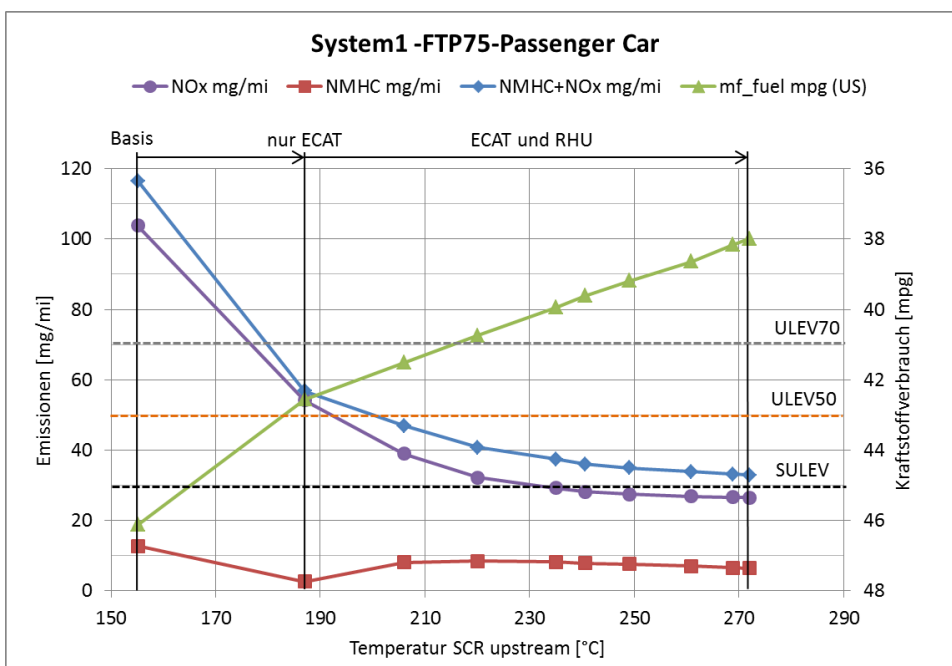


Abb. 0-14; Zyklusergebnisse System1 für FTP75 mit 6“DOC+50%



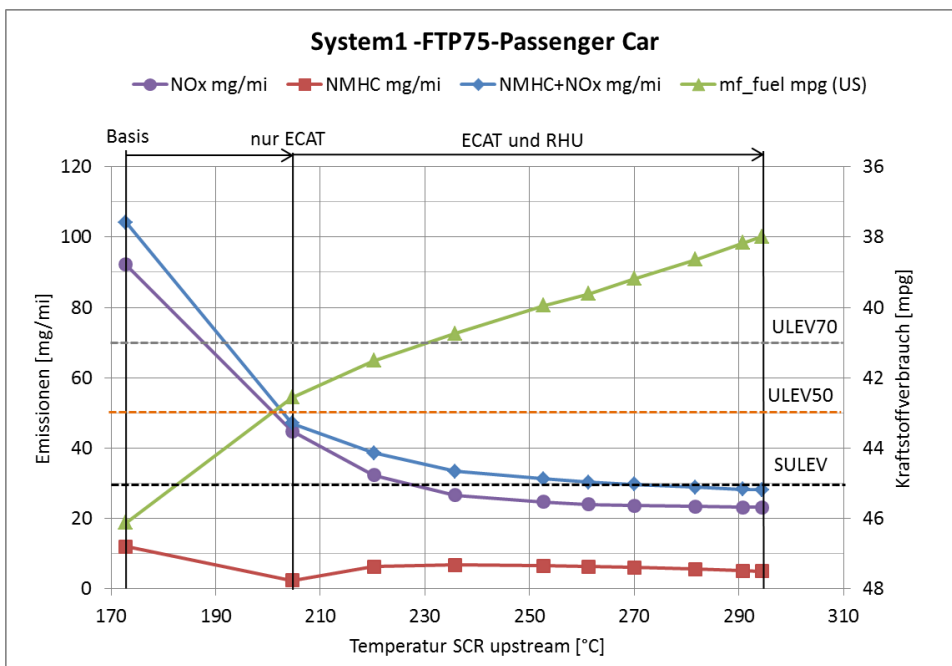


Abb. 0-15; Zyklusergebnisse System1 für FTP75 mit 6"DOC+50% parameteroptimiert

**e. Zyklusergebnisse Abgasnachbehandlungssystem2**

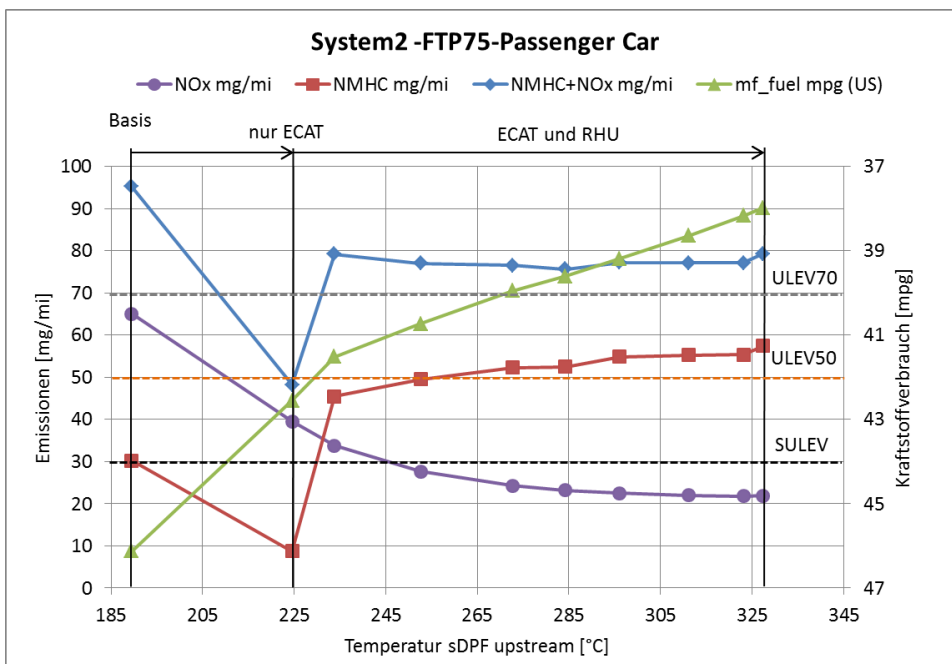


Abb. 0-16: Zyklusergebnisse System2 für FTP75 mit 6"DOC

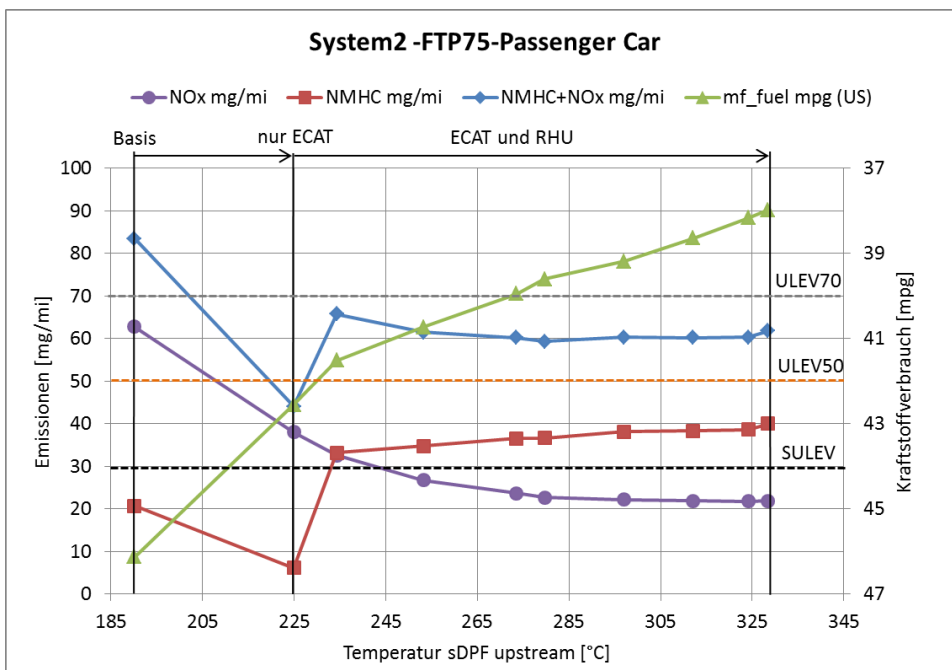


Abb. 0-17; Zyklusergebnisse System2 für FTP75 mit 6"DOC+50%

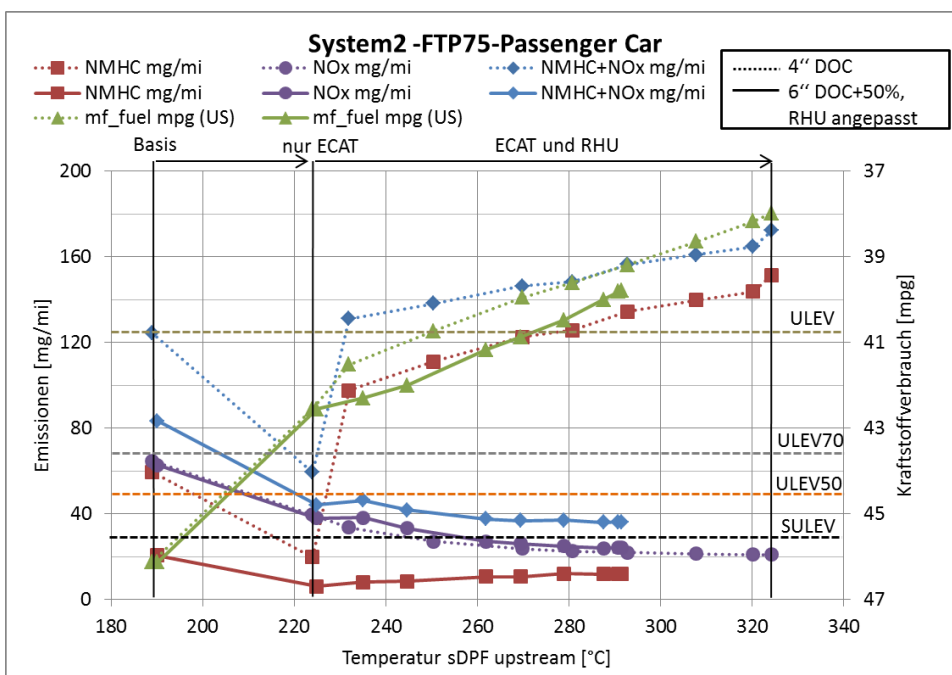


Abb. 0-18; Vergleich Zyklusergebnisse System2 6"DOC +50% mit 6"DOC+50% beste Variation