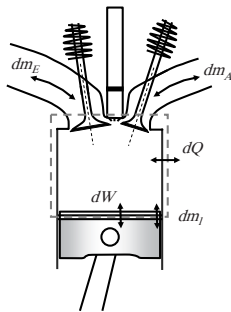


# Theoretische Grundlagen

## 3.1 Thermodynamik



**Abbildung 3.1:** Brennraum

mehrerer Stunden [26]. Die nulldimensionale Prozessrechnung hat zur Zeit als Einzige das Potenzial für eine Echtzeitanwendung [91, 172, 161].

Ein thermodynamisches System ist ein abgegrenzter Raum, der für die thermodynamischen Untersuchungen definiert wird. In diesem System herrscht ortsunabhängig der gleiche Druck und es dürfen nur gasförmige Komponenten enthalten sein. Eine Systemgrenze durch die der Materie- und Energietransport erfolgt, trennt das System von seiner Umgebung. Der Brennraum in Abbildung 3.1 mit dem Kolben, der Laufbuchse, den Ventiltellern und dem Zylinderkopf als Begrenzung wird häufig als ein solches System betrachtet [52]. Alle dem System zugeführten Energien sind positiv definiert, alle Abgeführten negativ. Folgende Energien können in das System ein- und austreten: Brennwärme  $Q_b$ , Wandwärme  $Q_w$ ,

Die Beschreibung der thermodynamischen Grundlagen dient dem Verständnis des dieser Arbeit zugrunde liegenden thermodynamischen Modells eines Ottomotors. Zur Berechnung und Analyse der innermotorischen Vorgänge existieren, je nach Detaillierungsgrad, verschiedene Berechnungsverfahren. Die 3D-CFD-Rechnung ist vor allem dort zu finden, wo eine detaillierte Analyse einzelner Betriebspunkte von Interesse ist. Die Berechnungsdauer eines vollen Arbeitsspiels liegt, trotz steigender Rechenleistung, immer noch im Bereich

Abgasenthalpie  $H_a$ , Ansaugenthalpie  $H_e$ , Volumenänderungsarbeit  $W$  und Leckage  $H_l$ . Zur Beschreibung dieser Zusammenhänge wird der erste Hauptsatz der Thermodynamik - hier in differentieller Form - verwendet, wobei die äußere Energie vernachlässigt ist.

$$\frac{dQ_b}{d\varphi} + \frac{dQ_w}{d\varphi} + \frac{H_a}{d\varphi} + \frac{H_e}{d\varphi} + \frac{W}{d\varphi} + \frac{H_l}{d\varphi} = \frac{U}{d\varphi} \quad (3.1)$$

Für die Änderung der inneren Energie  $U$  kann geschrieben werden:

$$\frac{dU}{d\varphi} = m_Z \frac{du}{d\varphi} + \frac{dm_Z}{d\varphi} u \quad (3.2)$$

Im einfachsten Fall besteht das System Brennraum aus einer einzigen homogen durchmischten Zone gleichen Druckes, gleicher Temperatur und Gaszusammensetzung (Einzonenmodell). Eine zweizonige Rechnung hingegen unterteilt den Brennraum in eine kalte, unverbrannte und eine heiße, verbrannte Zone. Während der Verbrennung tauschen beide Zonen Masse aus. Ein Massenstrom fließt von der unverbrannten in die verbrannte Zone. Die Gaszusammensetzung innerhalb einer Zone wird nach Unterteilung in unverbrannte Luft  $m_{L,wv}$ , unverbrannten dampfförmigen Kraftstoff  $m_{B,wv}$ , verbrannte Luft  $m_{L,v}$  und verbrannten Kraftstoff  $m_{B,v}$  wie folgt berechnet:

$$\lambda_{uv} = \frac{m_{L,wv} + m_{L,v}}{m_{B,wv} L_{st}} \quad (3.3)$$

$$\lambda_v = \frac{m_{L,wv} + m_{L,v}}{m_{B,v} L_{st}} \quad (3.4)$$

In jeder Zone muss neben dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik die thermische Zustandsgleichung erfüllt sein. In differentieller Form geschrieben:

$$p \frac{dV}{d\varphi} + V \frac{dp}{d\varphi} = m_Z R \frac{dT}{d\varphi} + m_Z T \frac{dR}{d\varphi} + R T \frac{dm_Z}{d\varphi} \quad (3.5)$$

Weder die spezifische innere Energie  $u$  in (3.2) noch die spezifische Gaskonstante  $R$  in (3.5) sind konstante Größen. Mit Gaszusammensetzung, Temperatur und Druck ändern sich diese beiden Größen, die die Kalorik bilden.

Die Konzentration der chemischen Verbindungen innerhalb der Gaskomponenten ändert sich durch die Verbrennung mit Druck und Temperatur. Dementsprechend sind die

kalorischen Eigenschaften von Druck, Temperatur und Gaszusammensetzung abhängig. Die Änderung der inneren Energie und der Gaskonstante ergeben sich zu:

$$\frac{du}{d\varphi} = \frac{\partial u}{\partial T} \frac{dT}{d\varphi} + \frac{\partial u}{\partial p} \frac{dp}{d\varphi} + \frac{\partial u}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{d\varphi} \quad (3.6)$$

$$\frac{dR}{d\varphi} = \frac{\partial R}{\partial T} \frac{dT}{d\varphi} + \frac{\partial R}{\partial p} \frac{dp}{d\varphi} + \frac{\partial R}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{d\varphi} \quad (3.7)$$

Es wird angenommen, dass sich das Arbeitsgas zu jedem Zeitpunkt im chemischen Gleichgewicht befindet. Der Einfluss der Reaktionskinetik ist nach [52, 64] gering. Die Bestimmung der partiellen Ableitungen nach den Parametern  $T$ ,  $p$  und  $\lambda$  kann numerisch erfolgen.

Rauchgas bezeichnet die Produkte der Verbrennung, wobei Frischluft als Rauchgas mit  $\lambda \rightarrow \infty$  aufgefasst wird. Das Arbeitsgas im Brennraum besteht aus Rauchgas und Kraftstoffdampf. Flüssiger Kraftstoff gehört nicht zur Definition eines thermodynamischen Systems und findet deshalb keine Berücksichtigung. Die innere Energie von Rauchgas als Funktion von Temperatur und Luftverhältnis bildet Justi [75] als einen empirischen Polynomansatz ab. Dieser Ansatz besitzt erhebliche Vereinfachungen, wie die Vernachlässigung von Dissoziationseffekten und Druckabhängigkeit, ist aber sehr schnell zu berechnen, was für die Online-Anwendung wichtig ist. Zacharias [191] verwendete erstmals den Komponentenansatz. Sind die Konzentrationen der einzelnen Spezies im Rauchgas bekannt, so können - auf der Berechnung des chemischen Gleichgewichts aufbauend - mit der Mischungsgleichung die Stoffgrößen des Gemisches bestimmt werden.

Für die Arbeitsprozessrechnung müssen nur etwa 9 bis 20 Spezies der Verbrennungsprodukte betrachtet werden [52]. Der Einfluss weiterer Stoffe ist gering. Zacharias verwendete 20 Spezies, wobei angenommen wurde, dass oberhalb von 1500 K chemisches Gleichgewicht vorliegt. Die Abweichungen des idealen Gasverhaltens vom realen wird von Zacharias [191] mit Einführung des Realgasfaktors berücksichtigt. Aufbauend auf den berechneten Stoffwerttabellen entwickelte er Approximationspolynome. Von de Jaegher [28] wurde ebenfalls der Komponentenansatz zusammen mit der Gleichgewichtsrechnung eingesetzt. Er berücksichtigte 19 Spezies des Rauchgases. Auf die Erstellung von Approximationspolynomen und die Berücksichtigung der Realgaseigenschaften wurde verzichtet. Großer Vorteil dieses Ansatzes ist die Erweiterung auf den unterstöchiometrischen Bereich. Grill [52] entwickelte einen Ansatz zur Berechnung der Stoffeigenschaften beliebiger Kraftstoffe. Er verwendete nur 9 Spezies ohne Einbußen von Rechengenauigkeit und betrachtete das chemische Gleichgewicht unterhalb einer Temperatur von 1600 K als „eingefroren“. Weitere Arbeiten zur Rauchgaskalorik existieren von Berner et al. [20] (Erdgas) und Hohlbaum [64], auf die an dieser Stelle nicht explizit eingegangen werden soll.

Ansätze zur Berechnung der Kalorik von Kraftstoffdampf sind in Plaum [134], Heywood [61] und Grill [52] zu finden. Alle drei Ansätze nutzen einen Polynomansatz in Abhängigkeit der Temperatur zur Beschreibung der spezifischen Enthalpie. Ausschließlich der Ansatz von Grill [52] ist auf beliebige Kraftstoffe anwendbar.

Die Berücksichtigung der Kraftstoffmassenänderung kann [12, 95] entnommen werden. Dabei ist zu beachten, dass die Verdampfung von flüssigem Kraftstoff dem Arbeitsgas Wärme entzieht. Für die einzonige Arbeitsprozessrechnung ergeben sich in Anlehnung an Grill [52] folgende zu lösende Gleichungen:

$$\frac{dp}{d\varphi} = \frac{\xi - \frac{dV}{d\varphi}}{\eta} \quad (3.8)$$

$$\frac{dT}{d\varphi} = \frac{a_Y - a_p \frac{dp}{d\varphi} - p \frac{dV}{d\varphi}}{a_T} \quad (3.9)$$

mit

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{a_Y - b_Y \frac{a_T}{b_T}}{p \left(1 - \frac{a_T}{b_T}\right)} \\ \eta &= \frac{a_p - b_p \frac{a_T}{b_T}}{p \left(1 - \frac{a_T}{b_T}\right)} \\ a_T &= m_Z \frac{\partial u}{\partial T} \\ a_p &= m_Z \frac{\partial u}{\partial p} \\ a_Y &= dQ_b + dQ_w \\ b_T &= -m_Z \left( R + T \frac{\partial R}{\partial T} \right) \\ b_p &= V_Z - m_Z T \frac{\partial R}{\partial p} \\ b_Y &= 0 \end{aligned}$$

Die Änderung der Zylindermasse nach „Einlass schließt“ wird vernachlässigt (keine Leckage, keine Kraftstoffeinspritzung nach „Einlass schließt“). Auf die Darstellung des zweizonigen Gleichungssystems sei hier verzichtet. Eine entsprechende Darstellung ist in [52] zu finden.

Nach Umstellen der Gleichung (3.5), Vernachlässigung der Änderung der spezifischen Gaskonstante und der Massenänderung während der Hochdruckphase ergibt sich:

$$\frac{dT}{d\varphi} = \frac{1}{R m_Z} \left( p \frac{dV}{d\varphi} + V \frac{dp}{d\varphi} \right) \quad (3.10)$$

Unter Vernachlässigung der Druck- und Gaszusammensetzungsabhängigkeit von  $u$  und  $R$ , der Annahme  $c_v = du/dT$ , Ersetzen von  $dW/d\varphi = -p \cdot dV/d\varphi$  und Einsetzen der Gleichung (3.10) in (3.1) ergibt sich:

$$\frac{dQ_h}{d\varphi} = \frac{dQ_b}{d\varphi} + \frac{dQ_w}{d\varphi} = \frac{c_v}{R} \left( p \frac{dV}{d\varphi} + V \frac{dp}{d\varphi} \right) + p \frac{dV}{d\varphi} \quad (3.11)$$

Für die Temperaturabhängigkeit von  $c_v/R$  wird ein linearer Ansatz mit geschätzter Temperatur 60°KW vor ZOT verwendet [11]:

$$\frac{1}{\kappa - 1} = \frac{c_v}{R} = 2.39 + 0.0008 \frac{T_{(-60)}}{p_{(-60)} V_{(-60)}} p V \quad (3.12)$$

Eine sehr einfach und schnell zu berechnende Gleichung der Druckänderung ergibt sich durch Umformen von (3.11) unter Verwendung von (3.12).

$$\frac{dp}{d\varphi} = \frac{1}{V} \left( (\kappa - 1) \frac{dQ_h}{d\varphi} - \kappa p \frac{dV}{d\varphi} \right) \quad (3.13)$$

Die Berechnung des Heizverlaufes folgt aus (3.11) und (3.12) zu [11]:

$$\frac{dQ_h}{d\varphi} = \frac{\kappa}{\kappa - 1} p \frac{dV}{d\varphi} + \frac{1}{\kappa - 1} V \frac{dp}{d\varphi} \quad (3.14)$$

Von Urlaub [176] wird für  $c_v$  ein einfacher Polynomansatz vorgeschlagen. Der Einfluss der verschiedenen Berechnungsverfahren nach Grill [52], Zacharias [191], Justi [75], Urlaub [176] und Bargende [11] in der Prozesssimulation wird in Kapitel 6.5 betrachtet. Weiterhin sei auf Grill [52] verwiesen, der unterschiedliche Kalorikansätze eingehend vergleicht und bewertet.

Der Wandwärmeübergang  $dQ_w$  wird mit dem Newtonschen Ansatz berechnet:

$$\frac{dQ_w}{dt} = \alpha A_w \Delta T \quad (3.15)$$

Berechnungsverfahren für den Wandwärmeübergangskoeffizienten  $\alpha$  existieren von Woschni [188], Woschni/Huber [67], Hohenberg [63], Bargende [8, 13] für den Brennraum und Zapf [192] für die Ein- und Auslasskanäle. Zur Umsetzung mit anschließender Ab-

schätzung des Rechenaufwandes kommen die Ansätze von Woschni und Bargende. Die Wandtemperatur kann nach Sargenti [146] berechnet oder als konstant angenommen werden. In Bargende [8] ist ein Ansatz zur Abschätzung der Temperatur für Zylinderkopf, Laufbuchse, Kolben, Einlass- und Auslassventile zu finden. Für die Untersuchungen in dieser Arbeit finden konstante Werte für Zylinderkopf, Laufbuchse und Kolben Anwendung [52], um Rechenzeit zu sparen.

Bei zweizoniger Rechnung ist auf eine korrekte Einbindung der Wandwärme zu achten. Alle oben genannten Verfahren zur Bestimmung des Wandwärmeübergangskoeffizienten basieren auf einer einzonigen Temperatur. Gleichung (3.15) liefert einen globalen Wandwärmestrom, der auf die einzelnen Zonen aufzuteilen ist. Ansätze hierzu liegen von [87, 64, 11] vor. In dieser Arbeit wird bei zweizoniger Rechnung folgender Ansatz nach Bargende [11] verwendet:

$$\frac{dQ_{w,uv}}{d\varphi} = \alpha_{uv,konv} A_{w,uv} (T_w - T_{uv}) \frac{dt}{d\varphi} \quad (3.16)$$

Der Wandwärmestrom der unverbrannten Zone berechnet sich mit dem konvektiven Anteil des Wandwärmeübergangskoeffizienten, d.h. der globale Ansatz ist mit der unverbrannten Temperatur und ohne Verbrennungsterm anzuwenden. Die momentan vom Unverbrannten beaufschlagte Fläche  $A_{w,uv}$  resultiert aus dem Verhältnis der Volumina oder der Annahme und entsprechenden Berechnungen zur hemisphärischen Flammenausbreitung. Der Wandwärmestrom der verbrannten Zone ergibt sich aus der Differenz des Gesamtwandwärmestroms und dem der unverbrannten Zone. Damit wird erreicht, dass die Summe des Wandwärmestroms beider Zonen dem globalen Wandwärmestrom entspricht.

Nach dem Ansaugtakt befindet sich angesaugte Frischluft und Restgas - entsprechend der Zusammensetzung des letzten Arbeitsspiels - im Zylinder. Findet die Einspritzung statt bevor das Einlassventil schließt, enthält der Brennraum zusätzlich dampfförmigen Kraftstoff.

$$m_{uv} = m_Z = m_L + m_R(+m_B) \quad (3.17)$$

Ein Austausch von Masse zwischen den jeweiligen Zonen bzw. über die Systemgrenze hinweg wird mit der Massenbilanz berechnet.

$$\frac{dm_Z}{d\varphi} = \frac{dm_a}{d\varphi} + \frac{dm_e}{d\varphi} + \frac{dm_l}{d\varphi} + \frac{dm_B}{d\varphi} \quad (3.18)$$

Leckage und Ladungswechselmassenstrom können gemeinsam durch eine Blendenströmung behandelt werden [52]. Der Massenstrom lässt sich unter Annahme adiabatischer

Zustandsänderung und der Vernachlässigung der Geschwindigkeit im Ausgangssystem wie folgt berechnen:

$$\frac{dm_{1,2}}{d\varphi} = A_{eff} p_1 \sqrt{\frac{1}{R_1 T_1}} \sqrt{\frac{2\kappa}{\kappa-1} \left( \left( \frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{2}{\kappa}} - \left( \frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{\kappa+1}{\kappa}} \right)} \frac{dt}{d\varphi} \quad (3.19)$$

Die Durchflussgleichung nach Saint-Venant und Wantzel ist für eine stationäre Drosselströmung im Intervall  $d\varphi$  gültig. Durch Ausschließen einer Überschallströmung kann bei Erreichen des kritischen Druckverhältnisses die Strömungsgeschwindigkeit nicht weiter steigen. Das Druckverhältnis  $p_2/p_1$  in (3.19) ist für Werte kleiner dem kritischen Druckverhältnis durch das kritische (3.20) zu ersetzen.

$$\Pi_{krit} = \frac{p_2}{p_1} = \left( \frac{2}{\kappa+1} \right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}} \quad (3.20)$$

Die Berechnung des Strömungsquerschnittes  $A_{eff}$  für die Modellierung von Ein- und Auslassventilströmung erfolgt in Abhängigkeit der Ventilhubkurven und der Durchflussbeiwerte. Die Verwendung einer konstanten Fläche dient der Modellierung der Leckageströmung. In der vorliegenden Arbeit wird der Leckagemassenstrom nicht berücksichtigt.

Der Brennverlauf  $dQ_b/d\varphi$ , der zeitliche Verlauf der Wärmefreisetzung im Brennraum, ist wie der Brennstoffmassenumsatz  $dm_B/d\varphi$ , der zeitliche Verlauf des Massenumsatzes von dampfförmigem Kraftstoff zu Rauchgas, stets von Modellannahmen abhängig. Zu diesen Annahmen gehören die Modellierung des Wandwärmeübergangs, der Kalorik bzw. die ein- oder mehrzonige Aufteilung des Brennrauminhaltes. Beide Größen können mittels des unteren Heizwertes und des Umsetzungswirkungsgrades ineinander umgerechnet werden.

$$\frac{dQ_b}{d\varphi} = \frac{dm_b}{d\varphi} H_u \eta_{um} \quad (3.21)$$

Der Umsetzungswirkungsgrad wird für stöchiometrische und magere Verbrennungen zu eins angenommen. Für unterstöchiometrische Verbrennung ist die Berechnung aus den kalorischen Gaseigenschaften oder aus Näherungsgleichungen möglich [52, 178]. Die Berechnung des Brennverlaufes bzw. des Massenumsatzes aus einem gemessenen Zylinderdruck wird als Druckverlaufsanalyse (DVA), der umgekehrte Weg als Arbeitsprozessrechnung (APR) bezeichnet. Die Modellierung bzw. Vorgabe des Brennstoffmassenumsatzes ist für die APR notwendig.

Zur Abstimmung und Adaption der Brennverlaufsmodelle (siehe Kapitel 6.1) dient die DVA. Die Gleichungen (3.22) und (3.23) zeigen für den eindimensionalen Fall die Berechnung von Temperatur- und Brennverlauf.

$$\frac{dT}{d\varphi} = \frac{p \frac{dV}{d\varphi} + V \frac{dp}{d\varphi} - m_Z T \left( \frac{\partial R}{\partial p} \frac{dp}{d\varphi} + \frac{\partial R}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{d\varphi} \right)}{m_Z \left( R + T \frac{\partial R}{\partial T} \right)} \quad (3.22)$$

$$\frac{dQ_b}{d\varphi} = m_Z \left( \frac{\partial u}{\partial T} \frac{dT}{d\varphi} + \frac{\partial u}{\partial p} \frac{dp}{d\varphi} + \frac{\partial u}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{d\varphi} \right) + p \frac{dV}{d\varphi} - \frac{dQ_w}{d\varphi} \quad (3.23)$$

Die einzonige Modellvorstellung nimmt zu jedem Zeitpunkt eine vollständige Durchmischung der Zylinderladung an. Hingegen unterscheidet das Zweizonen-Modell zwischen einer unverbrannten und einer verbrannten Temperatur. Bis zum Brennbeginn wird einzonig gerechnet. In der unverbrannten Zone sind Frischluft, Kraftstoffdampf und Restgas der vorangegangenen Verbrennung enthalten. Das gesamte Arbeitsgas hat eine Temperatur, die sogenannte Massenmitteltemperatur. Demnach ist auch der Wandwärmestrom der unverbrannten Zone zuzurechnen.

Nach dem Start der Verbrennung erfolgt eine Aufteilung der Zylindermasse in eine verbrannte und eine unverbrannte Masse. Die Flammenfront wird als unendlich dünn angenommen. Die beiden thermodynamischen Zonen sind durch einen Enthalpiestrom vom Unverbrannten ins Verbrannte miteinander verknüpft. Der Brennverlauf  $dQ_b/d\varphi$  wird komplett der verbrannten Zone zugeführt.

$$\frac{dm_v}{d\varphi} h_{uv} = - \frac{dm_{uv}}{d\varphi} h_{uv} \quad (3.24)$$

Die Modellierung einer globalen Turbulenz ist für einige weitere Modelle (z.B. Entrainment-Verbrennungsmodell [52, 53]) erforderlich. Aus diesem Grund soll das verwendete homogene, isotrope (örtlich konstant, zeitlich veränderlich)  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodell in Anlehnung an Grill [52] und Kožuch [87] kurz beschrieben werden. Im Hochdruckteil der Prozessrechnung gilt:

$$\frac{dk}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{k}{V_Z} \frac{dV_Z}{dt} - \varepsilon_{Diss} \frac{k^{1.5}}{l} + \left( \varepsilon_q \frac{k_q^{1.5}}{l} \right)_{\varphi > ZOT} - \varepsilon_E \frac{dk_E}{dt} - \varepsilon_{DT} \frac{c_m^3}{l} \quad (3.25)$$

Der erste Term beschreibt die Turbulenzzunahme in der Kompression und die Abnahmen in der Expansion durch die Kolbenbewegung. Die Abnahme der Turbulenz durch Dissipation hängt von der selbigen und dem charakteristischen Wirbeldurchmesser  $l$  ab. Mit steigender kinetischer Energie nimmt die Dissipation überproportional und mit kleiner



werdender Wirbelgröße proportional zu. Die Größe der Wirbel ist unter der Annahme eines Kugelvolumens, das dem Zylindervolumen entspricht, definiert zu:

$$l = \frac{6 V_Z^{\frac{1}{3}}}{\pi} \quad (3.26)$$

Die Turbulenzeinbringung aus der Kolbenmulde nach dem Oberen Totpunkt wird als Quetschströmung bezeichnet. Eine Darstellung der Gleichungen der radialen und axialen Komponente der Muldenströmung ist in Grill [52] und Bargende [8] zu finden. Die Turbulenzeinbringung durch die Einspritzung modelliert Barba [7] auf Basis der Ausgangstropfengeschwindigkeit  $u_{T,0}$ , der Annahme eines kompressiblen Mediums und der Verwendung des effektiven Düsenquerschnittes. Die Turbulenzgenerierung aus Drall- und Tumblezerfall beschreibt der letzte Term mit dem Koeffizienten  $\varepsilon_{DT}$ . Als Startwert zur Lösung der  $k$ - $\varepsilon$ -Differentialgleichung (3.25) wird folgende Gleichung verwendet [52]:

$$k_{ES} = C_k \frac{c_m}{n_{EV}} \frac{dz}{d_{EV}} \frac{\lambda_L}{h_{EV}} \quad (3.27)$$

Aus der spezifischen turbulenten Energie ergibt sich die Turbulenzgeschwindigkeit, die für die Modellierung der phänomenologischen Verbrennung notwendig ist:

$$u_T = \sqrt{\frac{2}{3} k} \quad (3.28)$$

## 3.2 Schadstoffbildung

Der Hochdruckprozess von Ottomotoren läuft global über- als auch unterstöchiometrisch ab. Dementsprechend sind im Abgas Konzentrationen von unverbrannten Kohlenwasserstoffen, Kohlenstoffmonoxid und Stickoxid vorhanden. Bei unterstöchiometrischer Verbrennung wird der Brennstoff trotz ausreichend hoher Temperatur aufgrund des Sauerstoffmangels nicht vollständig oxidiert. Bei überstöchiometrischer Verbrennung ist genügend Sauerstoff vorhanden. Dies führt bei ausreichend hoher Temperatur zur verstärkten Bildung von Stickoxid. Die überwiegend homogene Prozessführung beim Ottomotor und eine angepasste Einspritzstrategie vermeidet weitgehend die Bildung von Ruß [76, 78]. Eine Modellierung der Rußmasse wie auch die Abbildung der Partikelanzahl wird hier nicht verfolgt. Um die gesundheitsgefährdenden Schadstoffkomponenten  $NO$ ,  $CO$ ,  $HC$  als Beurteilungsgrößen innerhalb einer Motorsteuerung nutzbar zu machen, sind Schadstoffmodelle nötig.

## Stickoxidbildung

Unter bestimmten Umständen - hohe Temperatur, ausreichend Zeit, Verfügbarkeit von Sauerstoff - reagiert der sehr reaktionsträge Stickstoff mit dem Luftsauerstoff zu Stickoxiden. Während der Verbrennung entsteht fast ausschließlich Stickstoffmonoxid ( $NO$ ), das nach längerer Zeit unter atmosphärischen Bedingungen fast vollständig zu Stickstoffdioxid ( $NO_2$ ) umgewandelt wird [109]. Es lassen sich vier verschiedene Mechanismen der Stickoxidbildung durch Verbrennung unterscheiden [180]: Thermisches- $NO$ , Prompt- $NO$ ,  $NO$  aus Lachgas, Brennstoff- $NO$ . Thermisches  $NO$  (Zeldovic- $NO$ ) entsteht bei Temperaturen über 1700 K aus Luftstickstoff. Die Aufspaltung der stabilen Dreifachbindung von  $N_2$  benötigt eine hohe Aktivierungsenergie. Bereits bei niedrigen Temperaturen entsteht aus Luftstickstoff in der Flammenfront Prompt- $NO$  (Fenimore- $NO$ ). Wegen der relativ niedrigen Aktivierungsenergie der geschwindigkeitsbestimmenden Reaktion wird bereits bei  $T \approx 1000\text{K}$   $NO$  gebildet. Hohe Drücke und niedrige Temperaturen fördern die  $NO$ -Bildung über Lachgas ( $N_2O$ ). Das Temperaturniveau selbst hat nur einen geringen Einfluss. Diese Reaktion gewinnt an Bedeutung, wenn magere Verbrennungen und niedrige Temperaturen die Bildung von thermischem  $NO$  unterdrücken. Weiter kann Stickstoffmonoxid durch Konversion von Brennstoff-Stickstoff entstehen. Diese Bildungsmechanismen laufen unter verbrennungsmotorischen Bedingungen praktisch nie bis zum chemischen Gleichgewicht ab, weshalb sie als kinetisch kontrollierte Prozesse bezeichnet werden. In der motorischen Verbrennung spielt das thermischen  $NO$  die bedeutende Rolle. Der Beitrag der anderen Mechanismen zur Stickoxidemission ist zu vernachlässigen [59, 135, 109].

## Kohlenmonoxidbildung

Verläuft eine Verbrennung fett, läuft die Oxidation von Kohlenmonoxid ( $CO$ ) wegen des Sauerstoffmangels in Konkurrenz zur Oxidation von Wasserstoff ( $H_2$ ) ab. Die Reaktion von Wasserstoff zu Wasser befindet sich praktisch im chemischen Gleichgewicht, die Bildung von Kohlendioxid ( $CO_2$ ) aus  $CO$  ist hingegen kinetisch kontrolliert. Bei magerer Verbrennung läuft die Bildung von Kohlendioxid aus  $CO$  und  $OH$  aufgrund des fehlenden Wasserstoffs gebremst ab. Bei sehr mageren Gemischen entsteht vermehrt  $CO$  wegen der niedrigen Temperaturen und der verstärkt unvollständigen Verbrennung im wandnahen Bereich [108]. Die  $CO$ -Oxidation ist stark von der Verbrennungstemperatur abhängig, weshalb diese Reaktion während der Expansion stark gehemmt abläuft. Ab einem bestimmten Temperaturniveau ist keine Änderung der Konzentration mehr festzustellen, der „eingefrorene“ Gleichgewichtszustand ist erreicht [52].

Steuergerätetaugliche Verbrennungsoptimierung mit  
physikalischen Modellansätzen

Temmler, M.

2014, XX, 205 S. 106 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-658-07652-8