DOI: 10.16236/j.cnki.nrjxb.202501007

基于虚拟仿真模型的轻型车在用 RDE 排放预测

苏庆鹏，赵　华，胡雨馨，张　帆，裴毅强
（天津大学先进内燃动力全国重点实验室，天津 300350）

摘要：为进一步准确预测在用乘用车实时驾驶排放，搭建了以发动机-后处理虚拟仿真为核心的在用排放预测模型．首先建立了发动机一维模型，与稳态和瞬态发动机原排测试数据进行了对比和标定．结果表明：在用实际行驶排放测试(RDE)工况下，CO 和 NO 的原排累积质量相对误差分别为 9.2%、5.8%；其次进行后处理性能试验，对后处理温度、起燃和老化模型进行标定验证，在全球轻型车测试循环工况(WLTC)前 35 s，三元催化转化器轴向最大温度误差为 52 ℃，CO、NO 的排放累积质量误差为 0.038 5 g(5.90%)和 0.001 1 g(0.75%)；最后利用 RDE 排放预测模型在不同催化器老化状态下，进行 WLTC、RDE 和 95%分位的激烈驾驶参考循环(RTS-95)工况的排放规律探究．研究发现：NO 排放对工况更加敏感，超限风险更高．设定 NO 瞬时质量排放阈值为 8 mg/s，以 RTS-95 循环在分散因子为 0.6 条件下的 NO 仿真结果为例，对催化器分散因子进行预警窗口宽度探究，结果表明：增加预警窗口宽度将会降低误判率和冷启动超限的识别概率．

关键词：虚拟仿真模型；催化转化器老化；在用实际行驶排放测试；排放预测
中图分类号：TK411　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：1000-0909(2025)01-0055-09

RDE emission prediction for in-use light-duty vehicles based on virtual simulation model

Su Qingpeng，Zhao Hua，Hu Yuxin，Zhang Fan，Pei Yiqiang
（State Key Laboratory of Engines，Tianjin University，Tianjin 300350，China）

Abstract：An engine-after-treatment virtual simulation model was built for emission prediction of in-use light-duty vehicles under real drive emission（RDE） conditions. First，a one-dimensional engine model was built and calibrated with steady-state and transient experimental engine emissions. The results show that the relative errors of cumulative mass of CO and NO emissions are 9.2% and 5.8%，respectively，under RDE conditions. Secondly，the after-treatment performance tests were conducted，and the after-treatment temperature，light-off time and aging models were verified. The results show that during the first 35 s in world light vehicle test cycle（WLTC），the maximum error of temperature in the axial direction of the front catalytic converter is 52 ℃，and the absolute（relative） errors of post-catalytic cumulative masses of CO and NO are 0.038 5 g（5.90%） and 0.001 1 g（0.75%），respectively. Finally，the emission patterns of WLTC，RDE and standardized random test-aggressive driving style（RTS-95） working conditions were investigated under different catalytic converter aging conditions using the virtual simulation model. It is found that NO emission is more sensitive to the working conditions and the risk of exceeding the limit is higher. The NO instantaneous mass emission threshold is set to 8 mg/s，and the warning window width was investigated for the RTS-95 operating condition with a catalytic converter dispersion factor of 0.6. The result shows that increasing the warning window width will reduce the misjudgment rate and the recognition probability of cold start overrun.

Keywords：virtual simulation model；catalytic converter aging；in-use real drive emission measurement；emission prediction

收稿日期：2024-02-16；**修回日期**：2024-07-24.
基金项目：重庆市技术创新与应用发展重点资助项目(cstc2020jscx-dxwtBX0024)．
作者简介：苏庆鹏，博士研究生，suqingpeng@gacrnd.com.
通信作者：张　帆，博士，副教授，fanzhang_lund@tju.edu.cn.

随着中国环境保护和大气污染防治工作的逐步深入，乘用车国Ⅵ排放法规已全面实施，国Ⅵ排放法规相较国Ⅴ法规引入了实际驾驶排放测试（RDE）要求，用以间接监控车辆实际驾驶过程的排放水平. 轻型汽油车的排放测试通常是基于发动机底盘测功机进行，而 RDE 测试是根据实际路况进行行驶，不同地域不同时间会有不同的行驶工况. 车辆在实际道路上实测排放量与试验中特定工况下排放特性差异性较大，这给发动机排放功能开发和在用排放性能监测带来了巨大挑战[1-2]. 轻型车在用过程中，随着行驶里程的增加以及后处理的失效，催化器性能的老化和失效过程中的 RDE 在线排放预测显得格外重要，是目前在线排放检测的短板. 在用 RDE 排放预测不仅可以监测车辆实际使用的排放情况，对排放超标的工况可采取相应的提前预警措施，还可以对发动机排放开发和后处理系统的匹配优化提供数据和模型支持.

一般而言，后处理系统需要满足发动机优化导致的原排变化，并达到同样的后处理效果. 作为汽油机中应用最广泛的三元催化转化器（TWC），其老化特性的预测是一件很困难又非常重要的事情. 研究结果显示，发动机不正常燃烧、催化器与发动机距离较近及催化器内部受热不均都会导致催化剂受热老化[3-5]，且高温是导致老化的最重要的原因. 这是由于高温会导致 TWC 涂层中的 γ-氧化铝转变为 α-氧化铝，氧化铝发生相变，比表面积降低，使储氧量降低[6-7]；同时，贵金属与 CeO_2 在高温下出现烧结现象[8-9]. 李有东等[6]发现，当温度从 800 ℃升至 950 ℃，Pt 晶粒尺寸增大约两倍，CeO_2 晶粒尺寸也增大一倍以上. 因此，以 CeO_2 为代表的储氧量降低是后处理器老化的一个显著标志. 催化剂老化会提高反应温度，进而使得排放恶化. Kang 等[10]发现随着车辆行驶里程增加，TWC 活性降低，反应所需温度升高；Winkler 等[11]测 TWC 老化后的常见阿尔忒弥斯驾驶循环催后排放量，结果显示 NO 排放量增加一倍以上，HC 排放增加两倍以上. 同时，车辆排放性能评估已不局限于单一测试工况和新鲜催化器条件，而是拓展到老化催化器与真实道路驾驶工况，增大了催化器选型、排放标定等工作的难度、成本和周期. 催化器仿真作为研发体系中增效降本的有效手段，随着催化器模型和化学反应机理的不断完善和发展，模型精度和鲁棒性近年显著提升，TWC 模型研究也日益成熟，其中双点位储、清氧反应可提高不同温度下瞬态循环的排放模拟精度[12]；副产物相关反应的引入与标定也正在进行[13]；亦有使用长短期记忆（LSTM）神经网络建立 TWC 瞬态观测模型的研究[14]；催化器在不同涂敷条件下的排放特性模拟也得到充分重视[15]. 要实现轻型车在用 RDE 排放预测模型，准确的后处理及其老化模型的建立是必不可少的. 目前，还没有学者对整车完整瞬态工况以及完整生命周期内的瞬态排放的模拟预测.

基于此，笔者对某满足国Ⅵ排放法规的汽油轻型车搭建在用 RDE 排放预测模型. 该模型基于 GT-Power 发动机仿真软件搭建，由原排和后处理模型构成. 发动机原排使用一维燃烧模型，输入瞬态转速、转矩及过量空气系数对原排 CO 和 NO 体积分数进行预测. 后处理模型与原排模型耦合后，将真实车载自动诊断系统（OBD）测定储氧量作为老化指标输入模型，对催化器在不同老化程度下的工作状态进行模拟，计算催化器转化效率和出口排放物.

1 在用 RDE 排放预测平台构建

1.1 发动机模型

RDE 排放预测技术的核心是搭建具有一定鲁棒性的高精度发动机和后处理模型，并具有实时解算能力. 首先搭建了基于一维发动机模型，如图 1 所示，用于原排预测，由于 RDE 循环工况多变，采用给定燃烧参数的 Wiebe 燃烧模型无法适应，须使用预测燃烧模型对燃烧过程进行计算. 预测燃烧模型具备任意工况下燃烧放热率、燃烧效率、点火滞燃期和燃烧相位的预测能力，是一系列模型的统称，其包含流动模型、燃烧模型、点火模型和循环变动率（COV）模型等[16]. 流动计算方面，采用 GT-Power 自带的 EngCylFlow 模型，该模型可对缸内滚流比和湍动能、湍流尺度做出预测，为湍流燃烧模型提供输入. 燃烧模型以 SITurb 准维燃烧模型为基础，该模型以湍流尺度 λ 与层流火焰传播速度 S_L 之比 τ 作为时间尺度，用以控制进入反应区的混合气质量 M_e 向燃烧产物质量 M_b 转化的速率，即

$$\mathrm{d}M_e/\mathrm{d}t = \rho_u A(S_T + S_L) \tag{1}$$

$$\mathrm{d}M_b/\mathrm{d}t = (M_e - M_b)/\tau \tag{2}$$

$$\tau = \lambda/S_L \tag{3}$$

式中：ρ_u 为未燃气体密度；S_T 为湍流火焰传播速度；A 为火焰面面积.

根据缸内高温、高压环境分别对层流火焰传播速

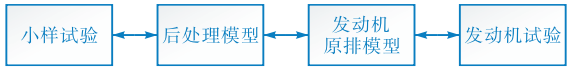


图 1 在用轻型车 RDE 排放预测模型

Fig.1 RDE emission prediction model for in-use light-duty vehicles

率 S_L 和湍流火焰传播速率 S_T 分别进行了重新推导拟合，如式(4)与式(5)所示.

$$S_L = A \cdot Y_{react}^{m} \cdot \left(\frac{T_u}{T^0}\right)^r \cdot \left(\frac{T_b - T^0}{T_b - T_u}\right)^n \tag{4}$$

$$S_T = S_L + S_L \frac{0.46}{Le} \cdot \frac{u'^{0.3}}{S_L} Re_T^{0.25} \left(\frac{p}{p_{ref}}\right)^{0.2} \tag{5}$$

式中：Y_{react}^{m} 为反应物的质量分数；T_u、T_b 和 T^0 分别为未燃、已燃和参考气体温度；m、r 和 n 为模型参数，分别取值为 1.7、1.1 和 2.2；u' 为湍流脉动速度；Le 为刘易斯数；p 为压力；Re_T 为湍流雷诺数. COV 模型在燃烧模型基础上构建，在湍流脉动速度中加入了随机正态分布随机变动因素，具备燃烧相位、持续期及平均有效压力(IMEP)的循环变动预测能力. 层流火焰传播速率来源于 Hann 等[17]研究结果；而湍流火焰传播速率则根据公式(5)[18-19]进行了重新拟合修正.

在一维模型开发的过程中，引入 CFD 计算对一维流动模型中随时间变化的滚流比和湍动能开展标定. 为了确定循环变动模型中的随机扰动，引入了大涡模拟，采用 CFD 得到的湍流脉动结果，对模型参数开展了标定. CO 和 NO 原排放模型分别使用经典的 CO 单步反应(公式(6))和 NO 三步反应(公式(7) ~ (9)).

$$CO + OH = CO_2 + H$$
$$k_1 = 6.76\times10^7 e^{T/1\,102} \tag{6}$$
$$O + N_2 = NO + N$$
$$k_2 = 7.60\times10^{10} e^{-38\,000/T} \tag{7}$$
$$N + O_2 = NO + O$$
$$k_3 = 6.40\times10^6 e^{-3\,150/T} \tag{8}$$
$$N + OH = NO + H$$
$$k_4 = 4.10\times10^{10} \tag{9}$$

式中：k_1、k_2、k_3 和 k_4 为各个反应的反应速率常数；T 为反应温度.

1.2　后处理模型

催化器详细参数如表 1 所示. 该模型由催化器进/出口管路一维模型、催化器换热模型和反应动力学模型构成. 催化器换热模型由白载体温升试验进行标定. 催化剂模型中主要涉及氧化(R1 ~ R3)、水煤气及蒸气重整(R4 ~ R5)、清氧储氧(R6 ~ R10)和 NO 还原(R11 ~ R13)4 类反应，反应动力学参数通过合成气小样起燃试验进行标定，并通过阿雷尼乌斯公式计算化学反应速率[20]，如表 2 所示，稳态模型标定结果见图 2，模型可以很好复现稳态 TWC 运行. 该小样试验采用 Hiden-HPR20 质谱检测反应器出口处各组分浓度.

所使用一维模型假设蜂窝状催化器各通道状态

表 1　催化器技术参数

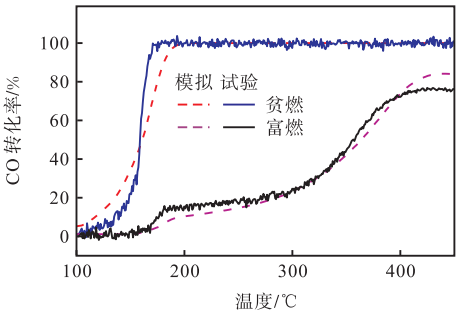
Tab.1　Catalyst specifications

参数	数值
长度/mm	180
直径/mm	100
贵金属载量/(g · 件$^{-1}$)	1.9
孔密度/(个 · cm^{-2})	93
壁厚/mm	7.6
轴向分区长度比	4.5 ∶ 5
贵金属涂敷比	6.5 ∶ 1
储氧量/(mg · L^{-1})	800

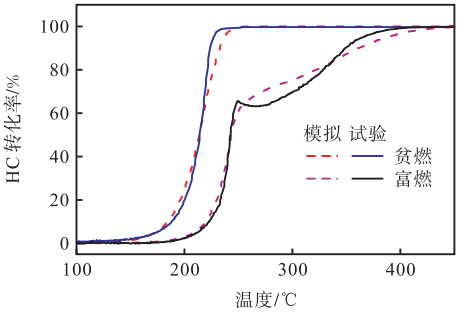
表 2　反应动力学参数

Tab.2　Reaction kinetic parameter

反应序号	反应物	生成物	指前因子	活化能/(kJ · mol^{-1})
R1	$CO + 0.5O_2$	CO_2	5.542×10^{13}	121.450
R2	$C_3H_6 + 4.5O_2$	$3CO_2 + 3H_2O$	1.917×10^{15}	129.530
R3	$H_2 + 0.5O_2$	H_2O	1.814×10^{15}	111.450
R4	$CO + H_2O$	$CO_2 + H_2$	1.800×10^{5}	56.720
R5	$C_3H_6 + 3H_2O$	$3CO + 6H_2$	1.230×10^{5}	81.920
R6	$2Ce_2O_3 + O_2$	$4CeO_2$	2.943	5.296
R7	$Ce_2O_3 + NO$	$2CeO_2 + 0.5N_2$	7.920×10^{2}	25.101
R8	$CO + 2CeO_2$	$Ce_2O_3 + CO_2$	1.824×10^{-1}	31.768
R9	$C_3H_6 + 12CeO_2$	$6Ce_2O_3 + 3CO + 3H_2O$	13.570	39.070
R10	$H_2 + 2CeO_2$	$Ce_2O_3 + H_2O$	2.845	31.768
R11	$CO + NO$	$CO_2 + 0.5N_2$	2.857×10^{9}	52.374
R12	$C_3H_6 + 9NO$	$3CO_2 + 3H_2O + 4.5N_2$	2.994×10^{11}	80.063
R13	$H_2 + NO$	$H_2O + 0.5N_2$	7.880×10^{10}	69.370



(a) CO



(b) HC

图 2　TWC 模型稳态起燃标定结果

Fig.2　Steady state ignition calibration results of TWC model

均一，通道内为拟均相圆柱形反应器，气相为理想气体，反应器内压力均匀恒定，忽略气体沿径向的流动. 催化器载体内发生的反应是排气组分与贵金属催化剂在载体壁面上进行的，即固体催化剂表面进行的催化反应. 根据气体质量和能量守恒定律及固体质量和能量守恒定律，可建立催化转化器内气/固两相的质量守恒和能量守恒数学模型. 催化器入口给定气体体积分数和温度，出口采用零梯度边界条件.

1.3　发动机模型验证

1.3.1　稳态原排的全工况验证

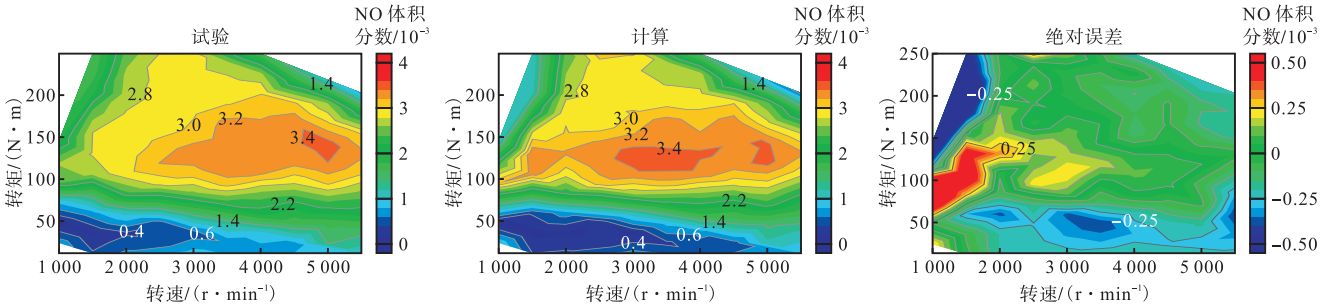
原排气体组分浓度对催化器工作状态有显著影响，因此，发动机稳态原排 NO、CO 体积分数的计算精度是在用 RDE 排放预测模型的基础. 这里的稳态及后续的瞬态工况都是采用直采设备：Horiba MEXA-ONE-D2 采集并测量催化器前发动机排气组分 CO、NO 等. 发动机参数如表 3 所示.

图 3 为稳态工况下试验和仿真得到的排气 NO、CO 体积分数以及绝对误差. 结果显示，发动机模型对 NO 峰值浓度预测准确，均在 $3.4\times10^{-3}\sim3.6\times10^{-3}$ 之间，但在高浓度区间的工况分布更宽，主要体现在中低转速（1 500 ~ 3 500 r/min）的中等负荷（100 ~ 150 N · m）工况. 在中等转速的小负荷区域，模型预测浓度相比试验值低. NO 体积分数整体预测精度较高，浓度误差小于 0.25×10^{-3} 的工况占比超过 70%. 模型误差最大的区域主要集中在低速大负荷区域，该区域气门重叠角较大，部分新鲜空气被扫出缸外. 由于扫气量直接决定了燃烧时缸内实际过量空气系数，而一维计算对扫气计算有一定的误差，导致预测的过量空气系数与实际存在一定偏差，最终对 NO 和 CO 排放均产生一定影响. 因此，需改进对扫气的预测精度以提高对排放的预测精度；而在中高转速的大负荷工况中，发动机存在混合气主动加浓，过量空气系数可控，模型对该加浓工况预测精度较高.

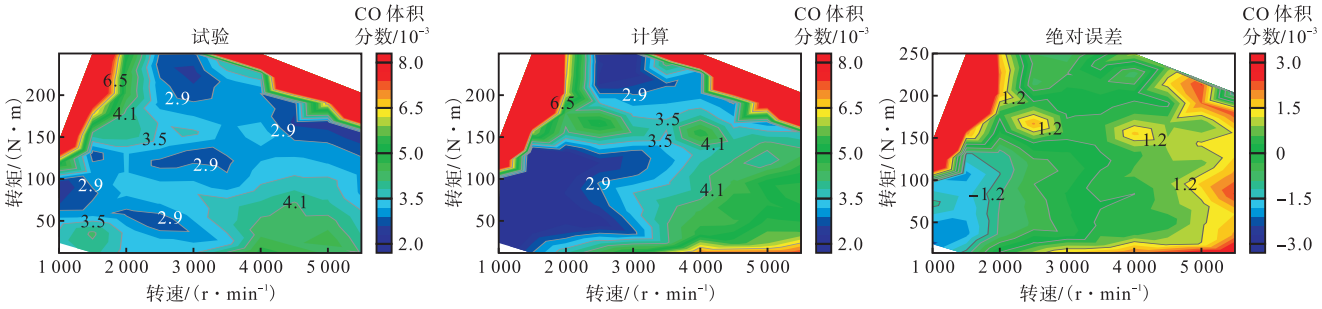
表 3　发动机技术参数

Tab.3　Engine specifications

参数	数值
缸径/mm	74
活塞行程/mm	87
排量/L	1.5
压缩比	11.4
喷油系统/MPa	35
喷油方式	汽油直接喷射式
最大功率/kW	130（5 500 r/min）
最大转矩/（N · m）	270（1 500 ~ 4 000 r/min）



（a）NO



（b）CO

图 3　稳态原排全工况验证

Fig.3　Verification of steady state engine out emission

1.3.2　瞬态原排测试循环验证

在整车瞬态试验中，按照排放法规，进行了 5 组不同工况下的试验，对应了国Ⅵ排放法规中的 WLTC 试验和自定义的 RDE 道路试验等测试循环，后者相较于 WLTC 弱化了怠速阶段的占比，强化了中速、高速和超高速的占比. 试验车辆技术参数见表 4，使用的发动机参数见表 3.

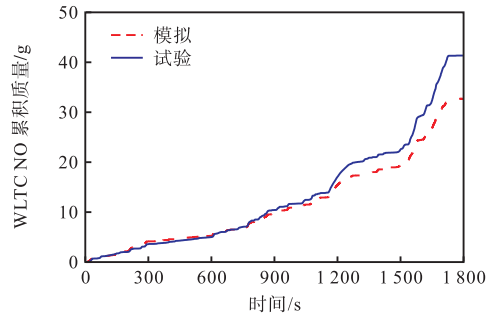
图 4 对比了试验和模拟的 WLTC 和 RDE 工况

下 NO 和 CO 的累计质量. 经过统计，WLTC 工况下累积 NO、CO 排放质量分别低于试验值 20.9%、10.2%，

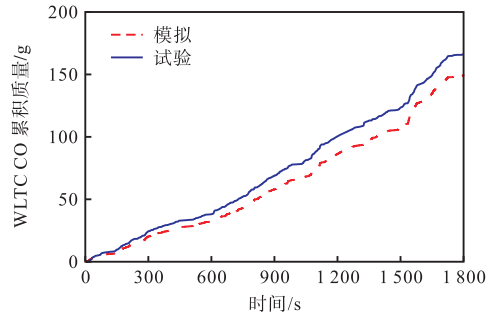
表 4　车辆技术参数

Tab.4　Vehicle specifications

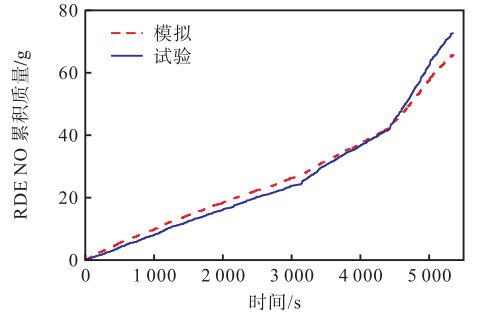
参数	数值
整备质量/kg	1 550
驱动方式	前驱
变速箱	7 速双离合变速器



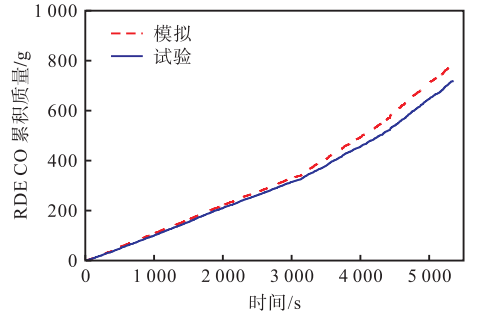
（a）WLTC NO 累积质量



（b）WLTC CO 累积质量



（c）RDE NO 累积质量



（d）RDE CO 累积质量

图 4　WLTC 和 RDE 原排累计质量验证

Fig.4　WLTC and RDE engine-out emissions cumulative quality verification

CO 的整体计算精度高于 NO，与稳态原排对应模拟结果对应. 需要说明的是，此处的误差是众多工况点的累积误差，产生原因涉及到稳态万有特性下的原排误差、瞬态下燃烧相位误差（稳态下试验的燃烧相位是燃烧分析仪测试的，是已知的参数，计算按照燃烧相位与试验相同处理，而瞬态下无法测量燃烧相位，计算以试验的点火角作为输入，燃烧相位与试验存在一定的偏差）和瞬态下控制精度误差等各种不确定因素. 而模拟的 CO 峰值普遍高于试验测量值，可能与发动机燃烧模型中对 CO 的预测整体偏高有关. 但是累积的 NO 与 CO 体积分数在各时间段试验值与模拟值吻合程度都较高.

1.4　后处理模型验证

1.4.1　换热模型验证

首先对后处理模型的换热模型进行标定，包括传热系数、热熔和热阻的标定，即对物理模型中涉及到的数学参数进行调整. 这里采用的是 WLTC 起燃阶段温度变化最剧烈、最难模拟的阶段进行温度的校验. 图 5 为试验和仿真得到的 WLTC 前 35 s 的催化器温度变化，4 个热电偶分别测得催化器入口、前 1/3、后 1/3 及催化器出口的温度变化. 可以看到，仿真值与试验值非常接近，能准确体现前级催化器瞬态起燃的 3 个阶段是：(1) 0 ~ 10 s 的怠速阶段，催化器温度缓慢上升；(2) 10 ~ 18 s 的加速阶段，催化器前部温度快速上升（前部完全起燃）；(3) 18 ~ 35 s 的催化器中后部起燃.

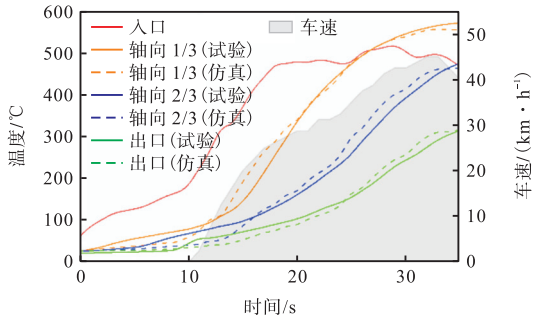


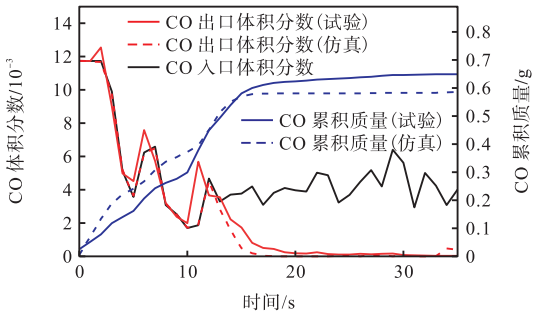
图 5　WLTC 起燃阶段催化器轴向温度变化

Fig.5　Change of axial temperature of catalytic converter during WLTC warming up stage

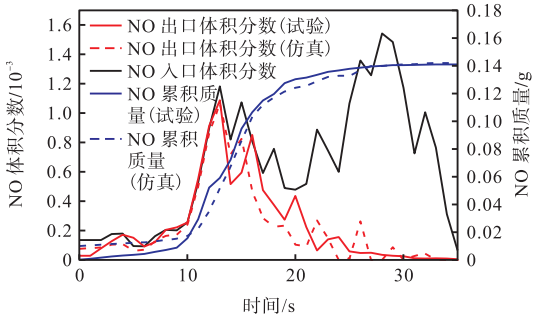
1.4.2　起燃模型验证

起燃阶段的模拟是 TWC 模拟的难点[21]，因而该阶段温度和浓度的准确预测决定了 TWC 瞬态模拟的精度. 图 6 为 CO 和 NO 在起燃阶段的进/出口瞬时体积分数和出口累积质量排放. 结果显示起燃模型对催化器出口体积分数和累积质量排放的计算精度较好，其中累积质量误差均小于 13%. 具体对比试验与仿真数据发现，该模型均在 20 s 左右完全起燃，

其中 CO 起燃较早，其次为 NO. 同时，该后处理模型能较准确地计算各种排放物在冷启动阶段的累积质量排放. 瞬态循环下的换热模型和起燃工况验证是后处理模型的核心，为下一步全生命周期的排放监测打下了基础.



（a）CO



（b）NO

图 6　起燃阶段催化器后体积分数及累积质量排放

Fig.6　Emission volume fraction and cumulative mass after catalytic converter during WLTC warming up stage

1.4.3　老化模型验证

为了进行生命周期的排放模拟，须将车辆的行驶公里数与催化器老化状态进行对应，而采用能够代表催化器储氧状态的实际分散因子 C_e 来表示催化器的老化性能是普遍采用的方法[22]. 定义催化器分散因子为当前活性点位密度/新鲜状态活性点位密度，用以表征催化器老化程度，老化程度越高，催化器 C_e 越低. 通过改变 C_e 可以模拟催化剂老化、中毒或部位的一般失活而导致的活性降低等现象，此处 C_e 进行归一化处理，并对老化后 C_e 进行标定. 车辆经过 16 万标准道路循环(SRC)，行驶里程获得的催化器测得其相应的老化状态，对应的催化器储氧量为 486 mg，C_e 为 0.52. 为简化老化模型，考虑 C_e 与铂族金属(PGM)同步老化，即两者 C_e 始终相同.

2　计算结果与分析

2.1　在用 RDE 排放预测结果

通过试验开展轻型车全生命周期的排放预测是一件费时、费力的工作. 这里通过对以上发动机模型和后处理模型的搭建，形成了一个可以进行轻型车在用 RDE 排放预测的仿真模型. 图 7 给出了轻型车在用 RDE 排放预测过程，即 C_e 和 PGM 在不同分散因子下对应的催化器，在 WLTC、RTS-95 和 RDE 测试循环下对 NO 和 CO 的预测. 图中排放因子定义为平均每公里的排放物质量.

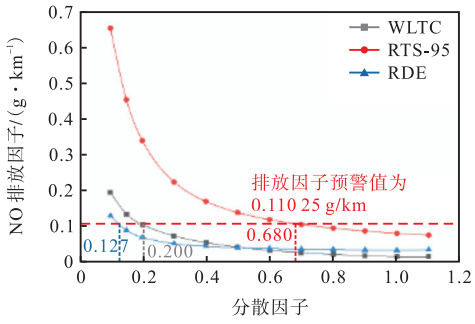
总览 NO 和 CO 排放物结果，最激进、行驶里程最短的 RTS-95 循环在不同老化程度(不同分散因子)下的排放均最高. 以 NO 排放结果为例，考虑到国Ⅵ标准以及前、后级催化器的作用比例，定义排放因子预警值 R_a 为

$$R_a = \lim_{6b} \cdot C_F / (m_{ex} / m_{mid}) \tag{10}$$

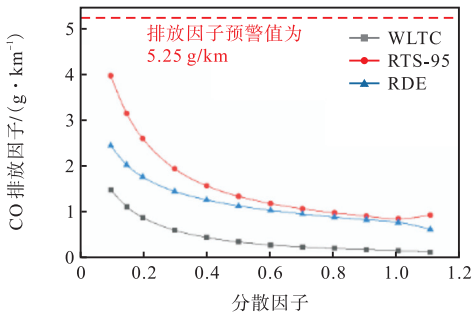
式中：$\lim_{6b}$ 为国Ⅵb Ⅰ型试验限值；C_F 为国Ⅵ排放法规中Ⅱ型试验符合性因子；m_{ex} 为当前测试车后级催化器出口累积质量；m_{mid} 为前级催化器出口累积质量.

计算得到 NO 排放因子预警值为 0.110 25 g/km. 从 RTS-95 循环的总体排放结果可知，NO 排放因子与驾驶工况、催化器分散因子的非线性度较高，在分散因子小于 0.5 时，排放因子急剧增大，在催化器失效阶段(分散因子小于或等于 0.2)的排放因子达到预警值的 6 倍，而更柔和的 WLTC、RDE 循环在催化器失效阶段的排放因子均小于预警值的 2 倍.

图 7(a)为在 3 种不同测试循环下的 NO 排放随分散因子变化曲线. 结果显示：在 16×10^4 km 等效耐



（a）NO



（b）CO

图 7　不同分散因子催化器在 WLTC、RTS-95 和 RDE 测试循环下的排放因子

Fig.7　Emission factors with different TWC dispersion factors in WLTC, RTS-95 and RDE test cycles

久里程(分散因子为 0.520)时，RDE 和 WLTC 循环中 NO 排放表现良好，在全生命使用周期内，在催化器失效阶段均会超过预警值. WLTC、RDE 循环的预警临界分散因子分别为 0.200、0.127，而在 RTS-95 循环中高达 0.680，表明在超过 RDE 限制的激进驾驶中，NO 排放对工况的敏感程度远超 CO，即在未来更严格的在用车排放法规中，需要通过更精细的催化剂匹配和发动机管理系统排放标定来降低该风险. 与之相反，图 7(b)中 CO 均未超过排放限值，即使在最激进的 RTS-95 循环且分散因子小于或等于 0.2 的情况，距离排放因子预警值(5.25 g/km)仍有超过 1.00 g/km 的余量. WLTC 与 RDE 循环的 CO 排放随老化的恶化趋势相似，RTS-95 循环在分散因子大于 0.5 时，排放因子与 RDE 循环接近，但随着老化程度进一步加深，RTS-95 循环的排放开始恶化，在催化器失效阶段远超 RDE 循环.

2.2　瞬时质量排放

确定了临界排放因子下对应的临界分散因子，提取后如表 5 所示. 相比于 CO 和 HC，NO 临界排放因子下对应的临界分散因子较高，且在 WLTC 工况下达到 0.680. 将主要针对超限风险最大的 NO 排放进行分析，并将基于公里数的排放因子(g/km)转化为瞬时质量排放(mg/s)，使用计算负担更小、更简易的方式对排放进行评价和预警.

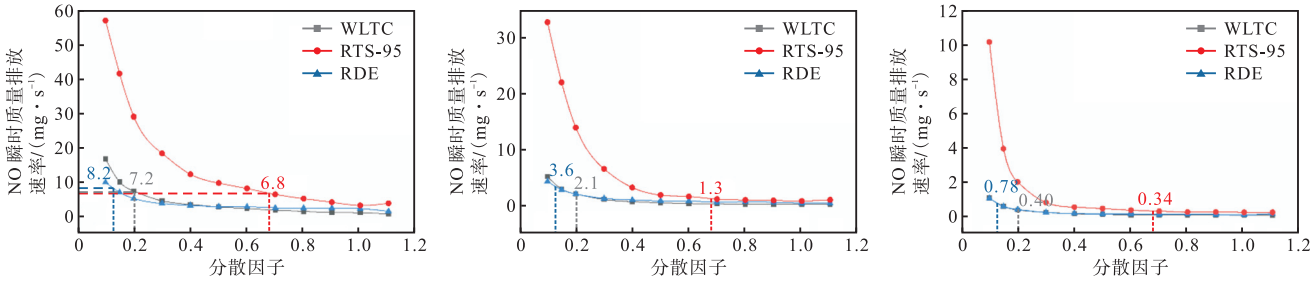
定义 80/90/95 百分位为完整循环下某污染物瞬时质量排放(mg/s)数值升序排列，取第 80/90/95 百分位数值，用以表征该循环某污染物的瞬时质量排放强度. 这里分别统计上节中瞬时 NO 质量排放的 95、90 和 80 百分位，结果如图 8 所示. 对比发现，95 百分位瞬时排放速率与排放因子变化趋势更接近(图 8(a)与图 7(a))，在催化器老化早期(分散因子为 0.5 ~ 1.0)便有上升. 更低百分位的瞬时排放对早期老化并不敏感，即使是 RTS-95 循环的 90、80 百分位瞬时排放也未出现显著变化，而是到分散因子小于 0.4 时，瞬时排放速率才显著上升. 由此可见，影响老化后排放因子的主要因素为瞬时排放速率的前 5%.

图 9 标识了临界分散因子对应的临界瞬时排放速率，直线为拟合值. 其中 95 百分位的临界瞬时排放速率(0.110 25 g/km)受驾驶工况影响很小，数值较接近，相应在 RTS、WLTC、RDE 循环中依次为 6.8、7.2 和 8.2 mg/s，而在更低的百分位统计时，则出现较大的相对差异.

表 5　不同物质临界排放因子下对应的临界分散因子

Tab.5　Corresponding critical diffusion factors under different critical emission factors

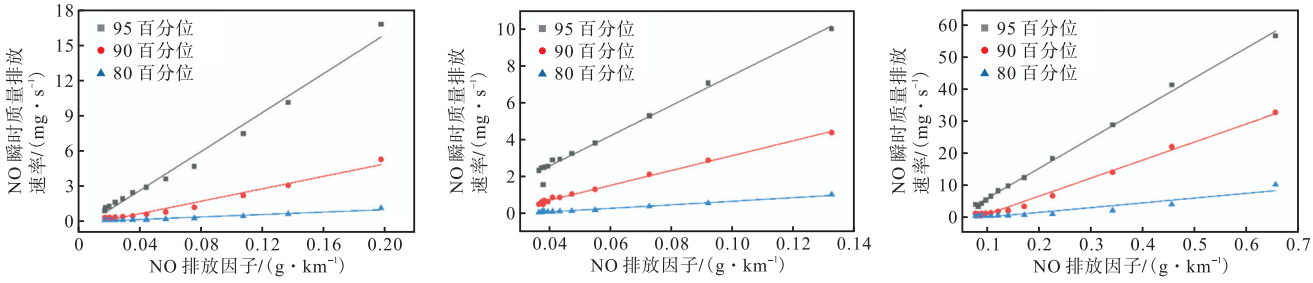
测试循环	NO	CO
WLTC	0.680	＜0.1
RTS-95	0.200	＜0.1
RDE	0.127	＜0.1



(a) 95 百分位　　(b) 90 百分位　　(c) 80 百分位

图 8　不同催化器分散因子在 WLTC、RTS-95 和 RDE 测试循环下的 NO 瞬时排放速率

Fig.8　NO instantaneous emission rate with different TWC dispersion factors under WLTC, RTS-95 and RDE test cycles



(a) WLTC　　(b) RDE　　(c) RTS-95

图 9　NO 排放因子与瞬时排放速率的相关性

Fig.9　Correlation between NO emission factor and NO instantaneous emission rate

以上结果表明，95 百分位的瞬时排放速率与完整循环的排放因子可能存在较大相关性，为此将两个排放指标进行相关性分析. 表 6 为图 9 对应的相关系数 R^2 统计结果. 综合结果发现，95 百分位点的相关性更好，且 RTS 测试循环下 R^2 达到 0.998. 一般认为，在 RDE 循环中大部分 NO 质量及颗粒物数量排放来源于高瞬时质量排放[23]，70% ~ 95% 的 NO 质量排放的时间占比仅为 3% ~ 20%. 特定 95 百分位点的 NO 瞬时排放可近似表征车辆在全生命周期内各驾驶工况的排放因子.

表 6 NO 排放因子与瞬时质量排放相关系数 R^2

Tab.6 R^2 of NO emission factor and instantaneous mass

工况	95 百分位	90 百分位	80 百分位
WLTC	0.986	0.970	0.952
RDE	0.987	0.996	0.989
RTS-95	0.998	0.990	0.890

2.3 NO 排放预警

在实际道路车辆排放预警中，OBD 根据催化器模型计算催后瞬时质量排放进行监控，在瞬时排放超过阈值后进行记录，低于阈值则不记录. 可以达到对 NO 排放进行有效预警的目的，而且该方式比计算排放因子更便捷（累积实时行驶里程及累积质量排放）. 图 10 为 RTS-95 测试工况下 NO 瞬时质量排放及超限警告窗口示意. 根据图 8 已知 95 百分位瞬时质量排放为 8.2 mg/s. 以 RTS-95 循环在分散因子为 0.6 条件下的 NO 仿真结果为例，该工况等效排放因子为 0.121 3 g/km，NO 瞬时质量排放计数阈值参考 95 百分位，设定为 8 mg/s，排放模型以 1 Hz 计算催后 NO 质量流量，并在超过 8 mg/s 时进行计数. 计数器用来记录最近的设定时间段内的排放超限数量. 图 10 同时显示了 NO 瞬时质量排放及计数窗口宽度分别为 100 s、300 s 的计数值. 当窗口宽度为 100 s 时，设定窗口期内超限率达到 5%（5 次）进行排放预警（如图 10 蓝线所示），标志着超过了瞬时质量排放阈值的参考 95 百分位（8 mg/s）；并且会分别在冷启动及高速工况进行 2 次报警，持续时长为 101 s 和 184 s. 将计数窗口增加至 300 s，则超限次数需达到 15 次才进行预警（如图 10 黄线所示），并在高速段达到报警限值，持续时长为 316 s. 需要说明的是，计数窗口宽度会对排放超限判定产生较大影响，计数窗口变窄会增加报警频次，降低单次报警持续时长，而计数窗口变宽则相反，且可能无法识别冷启动工况下的排放超限. 超限警告窗口时长与超限次数的定量分析如图 11 所示. 这里选用的数据是高速工况下，此时不同窗口长度对超限次数要求的影响较小，设置 16 次超限后报警可以基本适用于高速工况下不同窗口长度. 但计数窗口宽度会对排放超限判定产生一定影响，尤其是冷态启动工况，计数窗口变窄会增加报警频次，降低单次报警持续时长；而计数窗口变宽则相反，且可能无法识别冷启动工况下的排放超限.

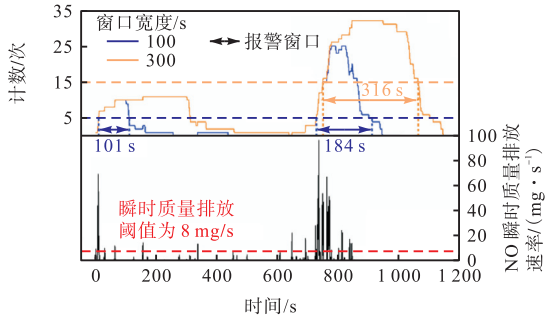


图 10 分散因子为 0.6 及 RTS-95 测试工况下 NO 瞬时质量排放及超限警告窗口示意

Fig.10 NO instantaneous mass emission and warning window under RTS-95 test condition with dispersion factor of 0.6

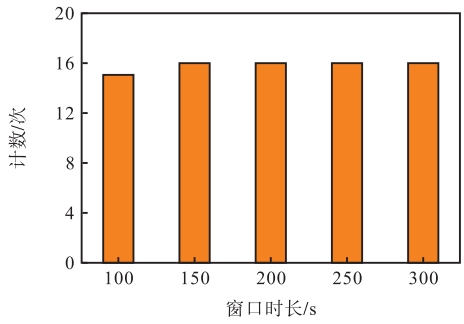


图 11 RTS-95 测试工况下超限警告窗口时长与超限次数关系

Fig.11 Relationship between the duration of the warning window and times under the high-speed condition the of RTS-95 test

3 结 论

（1）建立并验证给出了轻型车在用 RDE 排放预测模型，其中发动机模型稳态 NO 和 CO 模拟低误差工况占比超过 70%，瞬态测试循环峰值结果略有差异；后处理模型温度、起燃、老化验证模拟与试验值拟合较好，并对在用 RDE 排放预测模型准确性较高，可用于预测实际工况.

（2）在用 RDE 排放预测结果显示，对比 3 种气态排放物，NO 排放对发动机和催化器运行工况敏感程度更高；对比 3 种测试循环，工况最剧烈的 RTS-95 循环在催化剂不同老化程度下，3 种气体排放因子都最高，其中分散因子小于或等于 0.1 时，NO 排放因子为预警值 6 倍.

（3）80、90 百分位 NO 瞬时排放速率只在分散因子小于 0.4 时出现上升趋势，而 95 百分位该速率

在老化早期就出现上升，说明老化后排放因子主要受瞬时排放速率前 5% 影响.

（4）95 百分位 NO 瞬时排放速率与完整循环排放因子相关性较大，可选择 95 百分位 NO 瞬时排放近似表征在用阶段各驾驶工况的排放因子，在此基础上设置 NO 排放阈值进行排放预警.

参考文献：

［1］ 杨长志. 基于窗口动力学特性对平顺驾驶行为下轻型车 RDE 试验结果修正的研究[D]. 重庆：重庆大学动力工程学院，2020.

［2］ 岳大俊. 基于窗口动力学特性对激烈驾驶行为下重型车 RDE 试验结果的修正研究[D]. 重庆：重庆大学动力工程学院，2020.

［3］ Lee S，Bae C，Lee Y，et al. Effects of engine operating conditions on catalytic converter temperature in an SI engine[C]// SAE Paper. Detroit，Michigan，USA，2002，2002-01-1677.

［4］ 王翔，王维城，王栋，等. 汽车尾气催化器温度场的研究[J]. 清华大学学报：自然科学版，2002，42(5)：669-672.

［5］ 李艳光. 三效催化剂老化及失效机理的研究[D]. 北京：清华大学汽车工程系，2016.

［6］ 李有东，陈金亮. 三效催化转化器性能的劣化及其对策[J]. 小型内燃机与摩托车，2003，32(2)：32-34.

［7］ Papavasiliou A T，Matsouka V，Konsolakis M，et al. Synergistic structural and surface promotion of monometallic(Pt) TWCs：Effectiveness and thermal aging tolerance[J]. Applied Catalysis B：Environmental，2011，106：228-241.

［8］ 钱叶剑，潘涛，余自洋，等. 水热老化对三元催化器理化特性影响的试验研究[J]. 内燃机工程，2023，44(1)：100-108.

［9］ Yang W，Kim M Y，Polo-Garzon F，et al. CH_4 combustion over a commercial Pd/CeO_2-ZrO_2 three-way catalyst：Impact of thermal aging and sulfur exposure[J]. Chemical Engineering Journal，2023，451：138930.

［10］ Kang S B，Nam I S，Cho B K，et al. Universal activity function for predicting performance of Pd-based TWC as function of Pd loading and catalyst mileage[J]. Chemical Engineering Journal，2015，259：519-533.

［11］ Winkler A，Eyssler A，Mägli A，et al. Fuel impact on the aging of TWC's under real driving conditions[J]. Fuel，2013，111：855-864.

［12］ Della T A，Montenegro G，Onorati A，et al. Calibration of the oxygen storage reactions for the modeling of an automotive three-way catalyst[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research，2021，60(18)：6653-6661.

［13］ Bae W B，Kim D Y，Byun S W，et al. Emission of NH_3 and N_2O during NO reduction over commercial aged three-way catalyst(TWC)：Role of individual reductants in simulated exhausts[J]. Chemical Engineering Journal Advances，2022，9：100222.

［14］ 林伟鹏，陈韬，丁锋，等. 用于控制的三元催化转换器储氧量观测模型开发[J]. 内燃机学报，2023，41(4)：342-350.

［15］ Kannepalli S，Gremminger A，Tischer S，et al. Optimization of axial catalyst loading in transient-operated zone-structured monoliths：Reduction of cumulative emissions in automotive oxidation catalysts[J]. Chemical Engineering Science，2017，174：189-202.

［16］ Xu H，Wu J，Wei J，et al. Study on engineering application method of large-scale reaction mechanism in knock prediction[J]. Fuel，2023，331：125818.

［17］ Hann S，Grill M，Bargende M，et al. Reaction kinetics calculations and modeling of the laminar flame speeds of gasoline fuels[C]// SAE Paper. Detroit，Michigan，USA，2018，2018-01-0857.

［18］ Kobayashi H，Seyama K，Hagiwara H，et al. Burning velocity correlation of methane/air turbulent premixed flames at high pressure and high temperature[J]. Proceedings of the Combustion Institute，2005，30(1)：827-834.

［19］ Muppala S P R，Aluri N K，Dinkelacker F，et al. Development of an algebraic reaction rate closure for the numerical calculation of turbulent premixed methane，ethylene，and propane/air flames for pressures up to 1.0 MPa[J]，Combustion and Flame，2005，140(4)：257-326.

［20］ Ramanathan K，Sharma C S. Kinetic parameters estimation for three way catalyst modeling[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research，2011，50(17)：9960-9979.

［21］ Han D，Deng Y，Feng C，et al. Experimental and simulation study on Fe-beta controlling of hydrocarbon emission during cold start of gasoline vehicle world light vehicle test cycle[J]. Energy，2023，277：127748.

［22］ Kumar P，Makki I，Kerns J，et al. A low-dimensional model for describing the oxygen storage capacity and transient behavior of a three-way catalytic converter[J]. Chemical Engineering Science，2012，73：373-387.

［23］ Mera Z，Fonseca N，López J M，et al. Analysis of the high instantaneous NO emissions from Euro 6 diesel passenger cars under real driving conditions[J]. Applied Energy，2019，242：1074-1089.