

**Laboratorium Diagnostyki Pokładowej Pojazdów**

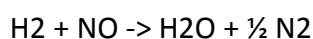
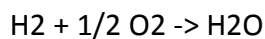
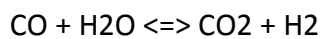
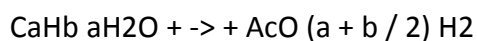
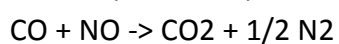
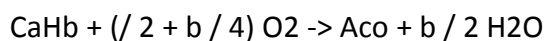
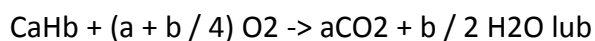
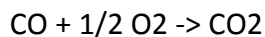
**Badania symulacyjne reaktora katalitycznego**

**Opracowanie: Marcin K. Wojs**

**Warszawa 2013**

## 1. Wstęp

Tematem ćwiczenia jest symulacja reaktora katalitycznego reprezentowanego przez katalizator trójdrożny – three way catalytic converter (3WCC). Ten układ wydechowy jest przystosowany do silników benzynowych o składzie mieszanki paliwo / powietrze zbliżonym do stechiometrycznego. Redukcja NO i CO oraz utlenianie HC można odbywać się w tej samej strukturze reaktora katalitycznego. Poniżej przedstawiono ogólne reakcje katalityczne zachodzące w 3WCC:



## 2. Przebieg ćwiczenia

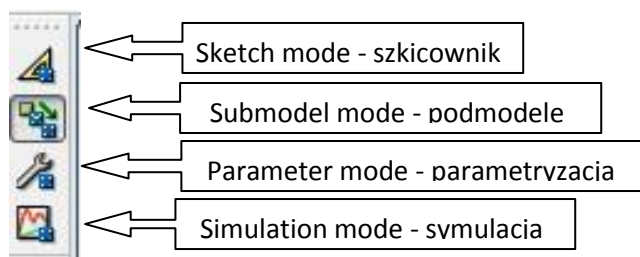
Zajęcia odbywają się przy wykorzystaniu oprogramowania Amesim firmy LMS Imagine.

Uruchamiamy program przy pomocy ikony:



**LMS Imagine.Lab**  
**AMESim Rev 13**

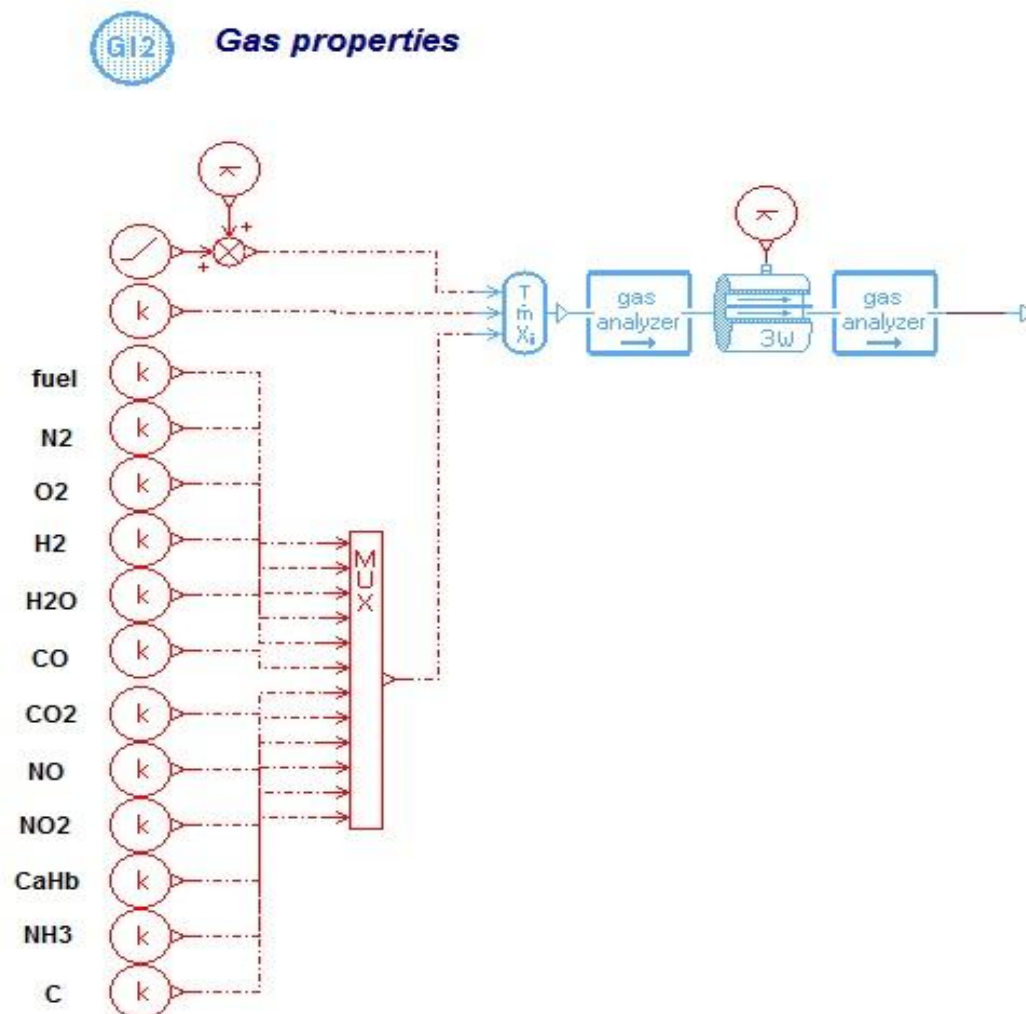
Nawigacja pomiędzy etapami symulacji odbywa się przy pomocy paska menu z rys.1.



Rys.1. Menu główne

## 2.1 Sketch mode

Pierwszym zadaniem wykonującego ćwiczenie jest zbudowanie modelu jak na rys.2.:



Rys.2. Model symulacyjny reaktora 3wcc

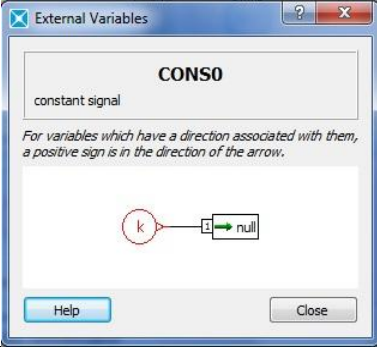
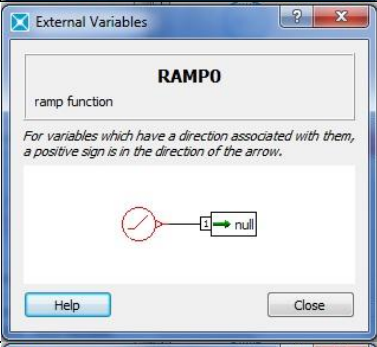
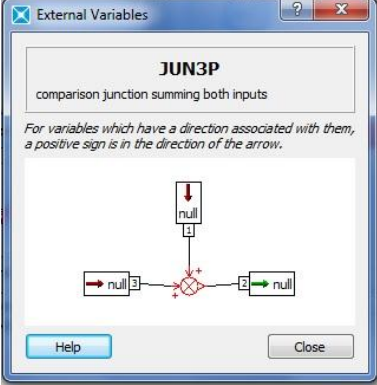
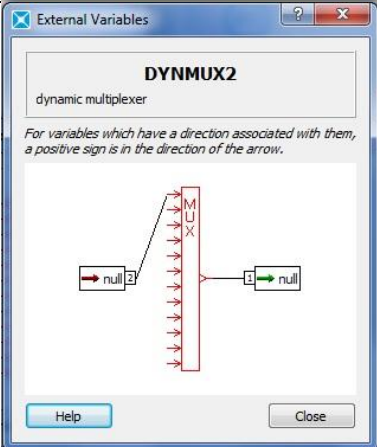
Model składa się z następujących elementów:

Biblioteka **IFP Exhaust**

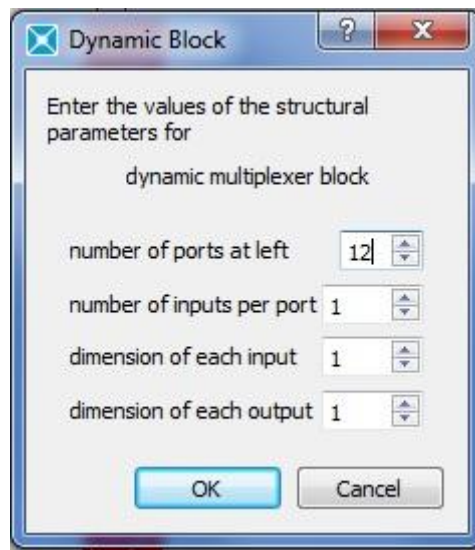
<p>External Variables</p> <p><b>EXHMD00</b> exhaust gas definition - 12 species</p> <p><i>For variables which have a direction associated with them, a positive sign is in the direction of the arrow.</i></p> <p>Help Close</p>	<p>Parametry gazu</p>
--	-----------------------

	<p>Reaktor katalityczny</p>
	<p>Analizator spalin</p>
	<p>Sumator parametrów gazu</p>
	<p>Źródło ciśnienia i temperatury atmosferycznej</p>

## Biblioteka **Signal, Control**

	Sygnał stały
	Sygnał narastający
	Sumator sygnałów
	Multiplekser

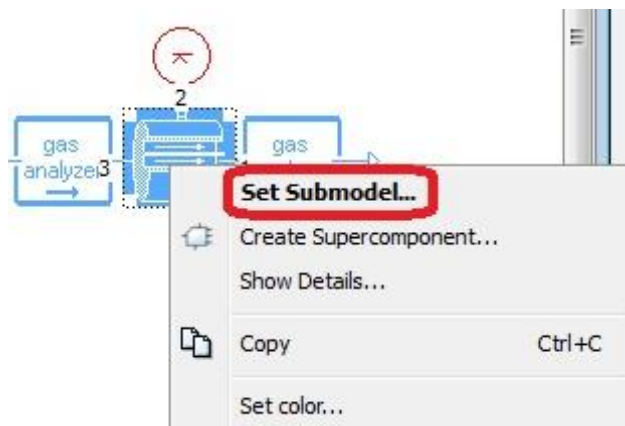
Wstawienie ostatniego elementu spowoduje pojawienie się dodatkowego menu, które należy wypełnić zgodnie z rys. 3.



Rys.3. Okno dialogowe opcji multiplexera

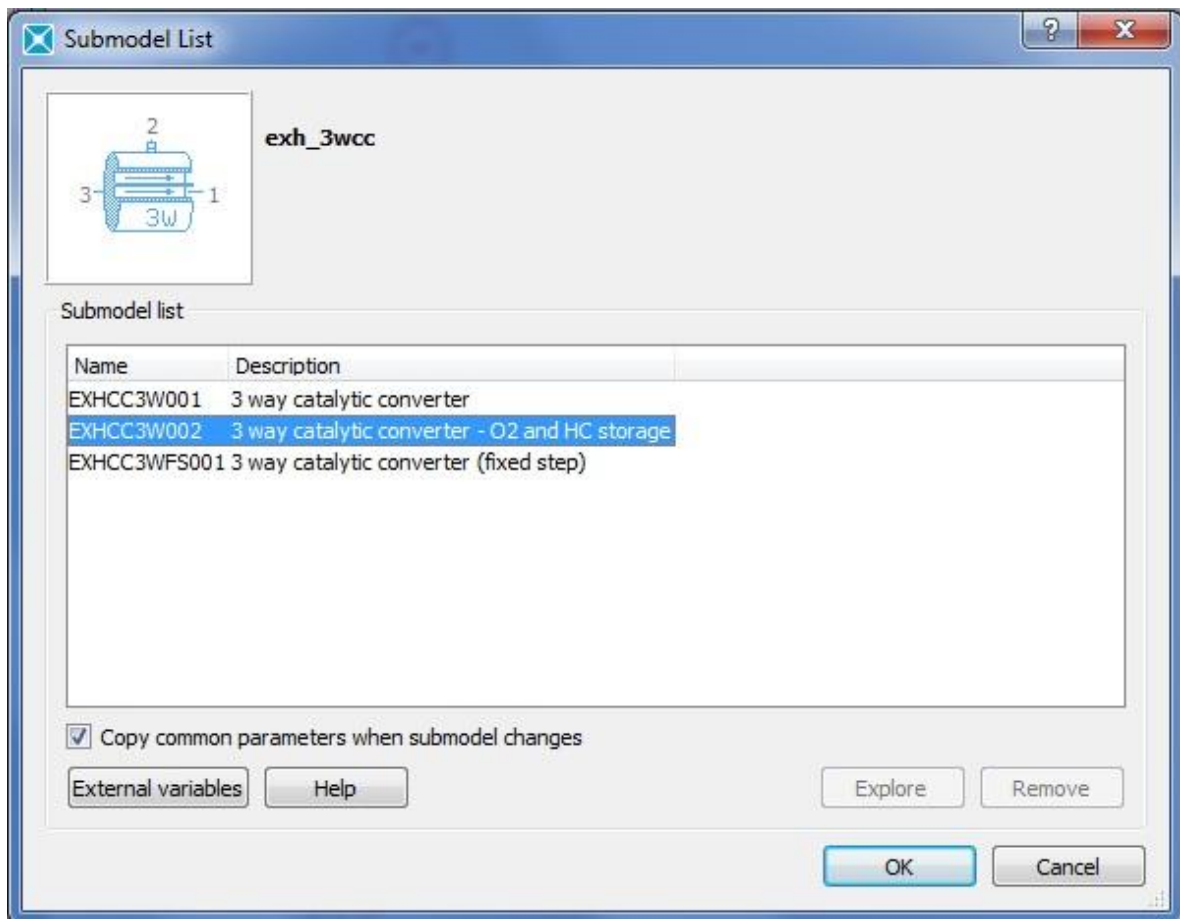
## 2.2 Submodel mode

Kolejnym etapem po złożeniu modelu symulacyjnego jest przejście do etapu definiowania submodeli. Jedynym submodelem który jej wymaga jest EXHCC3W czyli reaktor katalityczny. Wybór opcji odbywa się po kliknięciu na element prawym klawiszem i wybraniu **Set Submodel** jak na rys. 4.



Rys. 4. Wybór opcji ustawiania submodelu

Na rys. 5. przedstawione wszystkie możliwe opcje dla tego elementu, należy wybrać podświetloną na niebiesko.

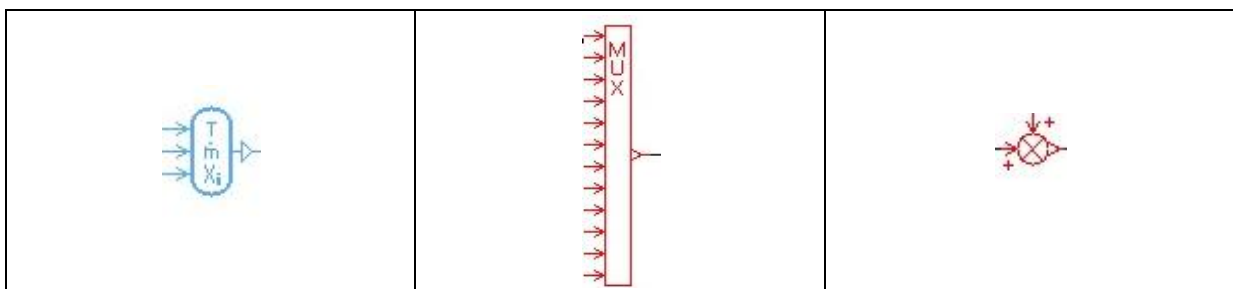


Rys. 5. Typy reaktora katalitycznego możliwe do wykorzystania w symulacji

### 2.3 Parameter mode

Wszystkie dane wejściowe niezbędne do uruchomienia symulacji ustawia się w **Parameter mode**. Odbywa się to po dwukrotnym kliknięciu na wybrany element. Wszystkie dane należy zaczerpnąć z poniższych ilustracji.

Elementy nie wymagające ustawienia to:



Parametr globalny:

**Submodel**

**exh\_fluid\_data [EXHMD00]**  
exhaust gas definition - 12 species

**Parameters**

Title	Value	Unit
mixture index		1
coeff x of CxHy for the fuel		3 null
coeff y of CxHy for the fuel		6 null
CxHy fuel heating value		45762 kJ/kg
enthalpy of formation for the fuel		20.41 kJ/mol
coeff a of CaHb for the hydrocarbons		3 null
coeff b of CaHb for the hydrocarbons		6 null
CaHb heating value		45762 kJ/kg
enthalpy of formation for the hydrocarbons		20.41 kJ/mol
filename for fuel (CxHy) thermodynamic properties	\$AME/libexh/data/Data_gas/Janaf-Yaws/C3H6_Janaf.data	
filename for HC (CaHb) thermodynamic properties	\$AME/libexh/data/Data_gas/Janaf-Yaws/C3H6_Janaf.data	
filename for soots (C) thermodynamic properties	\$AME/libexh/data/Data_gas/Janaf-Yaws/Soot_Janaf.data	
directory for the gas properties of the other species	\$AME/libexh/data/Data_gas/Janaf-Yaws	

Parametry elementów IPF:

**Submodel**


**exh\_pressureplug\_2 [EXHAS001]**  
source of atmospheric pressure and temperature

**Parameters**

Title	Value	Unit
mixture index		1
fuel mass fraction		0 null
N2 mass fraction	0.7686	null
O2 mass fraction	0.2314	null
H2 mass fraction		0 null
H2O mass fraction		0 null
CO mass fraction		0 null
CO2 mass fraction		0 null
NO mass fraction		0 null
NO2 mass fraction		0 null
HC mass fraction		0 null
NH3 mass fraction		0 null
C (Soots) mass fraction		0 null



Submodel

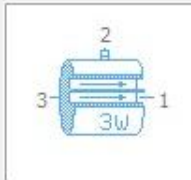


**gas\_analyzer\_3 [EXHCONV01]**  
gas analyzer

Parameters

Title	Value	Unit
mixture index		1
residual humidity in analyzer	0.01	null
H2/CO ratio if constant	0.3	null

### Reaktor katalityczny



**exh\_3wcc\_6 [EXHCC3W002]**  
3 way catalytic converter - O2 and HC storage

Parameters

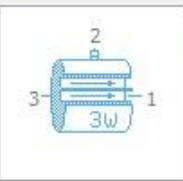
Title	Value	Unit
mixture index		1
reaction used for HC oxidation	$CxHy + (x+y/4) O2 \rightarrow x CO2 + y/4 H2O$	
geometry characterization		conventional
channel type		square
diffusion process		off
<ul style="list-style-type: none"> <li>geometry           <ul style="list-style-type: none"> <li>monolith length</li> <li>monolith diameter</li> <li>monolith apparent density</li> <li>psi : number of cells / square inch</li> <li>wall thickness</li> </ul> </li> <li># initial conditions           <ul style="list-style-type: none"> <li>monolith temperature at port 2</li> <li>pressure at port 3</li> <li>temperature at port 3</li> <li>slow HC (fuel) stored quantity</li> <li>fast HC (CaHb) stored quantity</li> <li>O2 stored quantity</li> <li>fuel mass fraction</li> <li>N2 mass fraction</li> <li>O2 mass fraction</li> <li>H2 mass fraction</li> <li>H2O mass fraction</li> <li>CO mass fraction</li> <li>CO2 mass fraction</li> <li>NO mass fraction</li> <li>NO2 mass fraction</li> <li>HC mass fraction</li> <li>NH3 mass fraction</li> <li>C (Soots) mass fraction</li> </ul> </li> </ul>		
		200 mm
		144 mm
		513 kg/m**3
		200 null
		0.118 mm
		20 degC
		1.013 barA
		293.15 K
		0 mol/m**3
		0 mol/m**3
		0 mol/m**3
		0 null
		0.7686 null
		0.2314 null
		0 null
		0 null
		0 null
		0 null
		0 null
		0 null
		0 null
		0 null
		0 null
		0 null

Parameters		
Title	Value	Unit
kinetics constants		
CO/O2 reaction		
CO/O2 preexponential factor	1.72e+17	mol.K/s/m**2
CO/O2 activation energy	117000	J/mol
fuel/O2 reaction		
fuel/O2 preexponential factor	1.16e+15	mol.K/s/m**2
fuel/O2 activation energy	83700	J/mol
beta function (CO/NO; HC/NO)	inactive	
HC trap	active	
HC/O2 reaction		
HC/O2 preexponential factor	1.16e+15	mol.K/s/m**2
HC/O2 activation energy	83700	J/mol
CO/NO reaction		
CO/NO preexponential factor	1.6e+12	mol.K/s/m**2
CO/NO activation energy	89100	J/mol
fuel/NO reaction		
fuel/NO preexponential factor	5.47e+17	mol.K/s/m**2
fuel/NO activation energy	121600	J/mol
HC/NO reaction		
HC/NO preexponential factor	5.47e+17	mol.K/s/m**2
HC/NO activation energy	121600	J/mol
fuel/H2O reaction		
fuel/H2O preexponential factor	1.04e+08	mol.K/s/m**2
fuel/H2O activation energy	46900	J/mol
HC/H2O reaction		
HC/H2O preexponential factor	1.04e+08	mol.K/s/m**2
HC/H2O activation energy	46900	J/mol
CO/H2O reaction		
CO/H2O preexponential factor	5.77e+10	mol.K/s/m**2
CO/H2O activation energy	90300	J/mol
pre exponential factor for CO/H2O equilibrium constant	0.0126	null
activation energy for CO/H2O equilibrium constant	29000	null

Parameters		
Title	Value	Unit
<ul style="list-style-type: none"> <li>▲ <b>CO/H2O reaction</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>CO/H2O preexponential factor</li> <li>CO/H2O activation energy</li> <li>pre exponential factor for CO/H2O equilibrium constant</li> <li>activation energy for CO/H2O equilibrium constant</li> </ul> </li> <li>▲ <b>H2/O2 reaction</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>H2/O2 preexponential factor</li> <li>H2/O2 activation energy</li> </ul> </li> <li>▲ <b>H2/NO reaction</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>H2/NO preexponential factor</li> <li>H2/NO activation energy</li> </ul> </li> <li>▲ <b>HC storage</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>slow HC (fuel) storage capacity</li> <li>fast HC (CaHb) storage capacity</li> <li>adsorption amplitude for slow HC (fuel) storage</li> <li>adsorption amplitude for fast HC (CaHb) storage</li> <li>adsorption activation energy for slow HC (fuel) storage</li> <li>adsorption activation energy for fast HC (CaHb) storage</li> <li>desorption amplitude for slow HC (fuel) storage</li> <li>desorption amplitude for fast HC (CaHb) storage</li> <li>desorption activation energy for slow HC (fuel) storage</li> <li>desorption activation energy for fast HC (CaHb) storage</li> </ul> </li> <li>▲ <b>O2 storage</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>O2 storage capacity (Ceria)</li> <li>preexp constant for Ceria oxidation</li> <li>preexp constant for Ceria reduction with CO</li> <li>preexp constant for Ceria reduction with slow HC</li> <li>preexp constant for Ceria reduction with fast HC</li> <li>activation energy for Ceria oxidation</li> <li>activation energy for Ceria reduction with CO</li> <li>activation energy for Ceria reduction with slow HC</li> <li>activation energy for Ceria reduction with fast HC</li> </ul> </li> </ul>	<p>5.77e+10</p> <p>90300</p> <p>0.0126</p> <p>29000</p> <p>0</p> <p>117000</p> <p>0</p> <p>50000</p> <p>0</p> <p>0</p> <p>2000</p> <p>2000</p> <p>26000</p> <p>26000</p> <p>2e+07</p> <p>2e+07</p> <p>80000</p> <p>80000</p> <p>60</p> <p>300000</p> <p>150000</p> <p>260000</p> <p>260000</p> <p>90000</p> <p>90000</p> <p>90000</p> <p>90000</p>	<p>mol.K/s/m**2</p> <p>J/mol</p> <p>null</p> <p>null</p> <p>mol.K/s/m**2</p> <p>J/mol</p> <p>mol.K/s/m**2</p> <p>J/mol</p> <p>mol/m**3</p> <p>mol/m**3</p> <p>m**3/mol/s</p> <p>m**3/mol/s</p> <p>J/mol</p> <p>J/mol</p> <p>/s</p> <p>/s</p> <p>J/mol</p> <p>J/mol</p> <p>J/mol</p> <p>J/mol</p> <p>mol/m**3</p> <p>mol/m**2/s</p> <p>mol/m**2/s</p> <p>mol/m**2/s</p> <p>mol/m**2/s</p> <p>J/mol</p> <p>J/mol</p> <p>J/mol</p> <p>J/mol</p>

**Change Parameters**

Submodel



**exh\_3wcc\_6 [EXHCC3W002]**

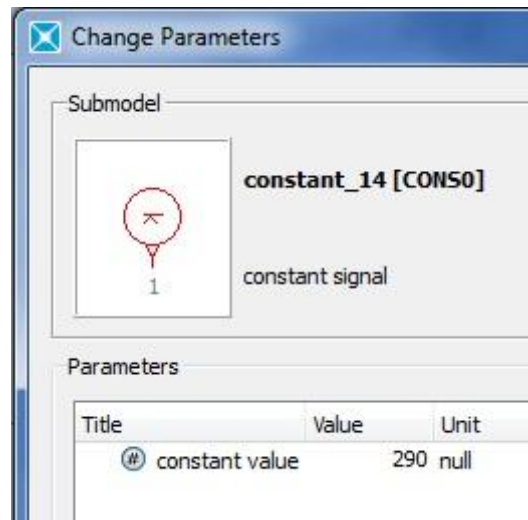
3 way catalytic converter -  
O2 and HC storage

Parameters

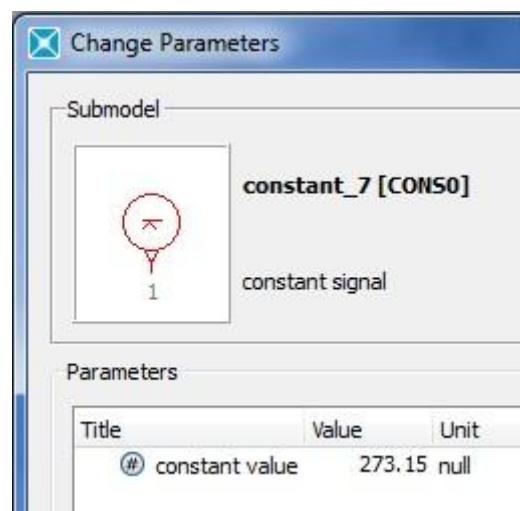
Title	Value	Unit
mixture index		1
reaction used for HC oxidation	$CxHy + (x+y/4) O2 \rightarrow x CO2 + y/4 H2O$	
geometry characterization		conventional
channel type		square
diffusion process		off
▶ geometry		
▶ # initial conditions		
▶ kinetics constants		
▲ heat transfer		
...ctive coefficient used for heat transfer between monolith and gas		1 null
...acity as a function of wall temperature twC (in degC) or twK (in K)	$1071. +0.156*twK-3435.141210/twK/twK$	

Parametry sygnałów:

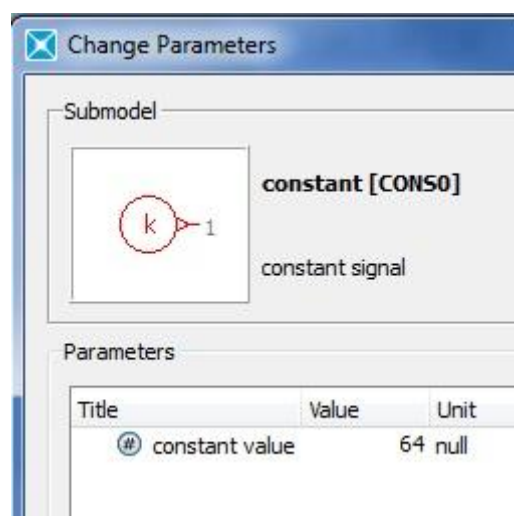
Sygnal dla reaktora katalitycznego



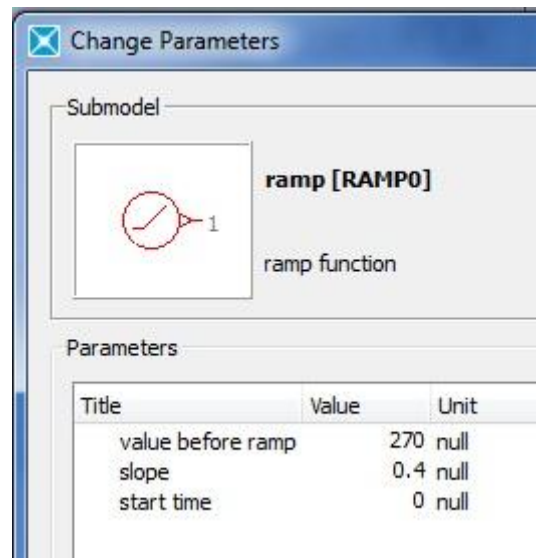
Sygnal dla sumatora sygnałów



Sygnal dla sumatora parametrów gazu



Sygnal narastający

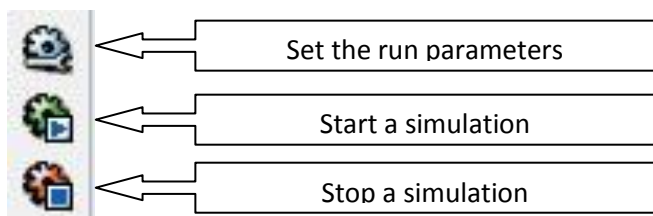


Sygnaty dla multipleksera

Fuel	0
N2	0
O2	Od 0,00001 do 0,01
H2	0
H2O	0
CO	0,0001
CO2	0,2
NO	0,0002
NO2	0,00001
CaHb	0,00006
Nh3	0
C	0

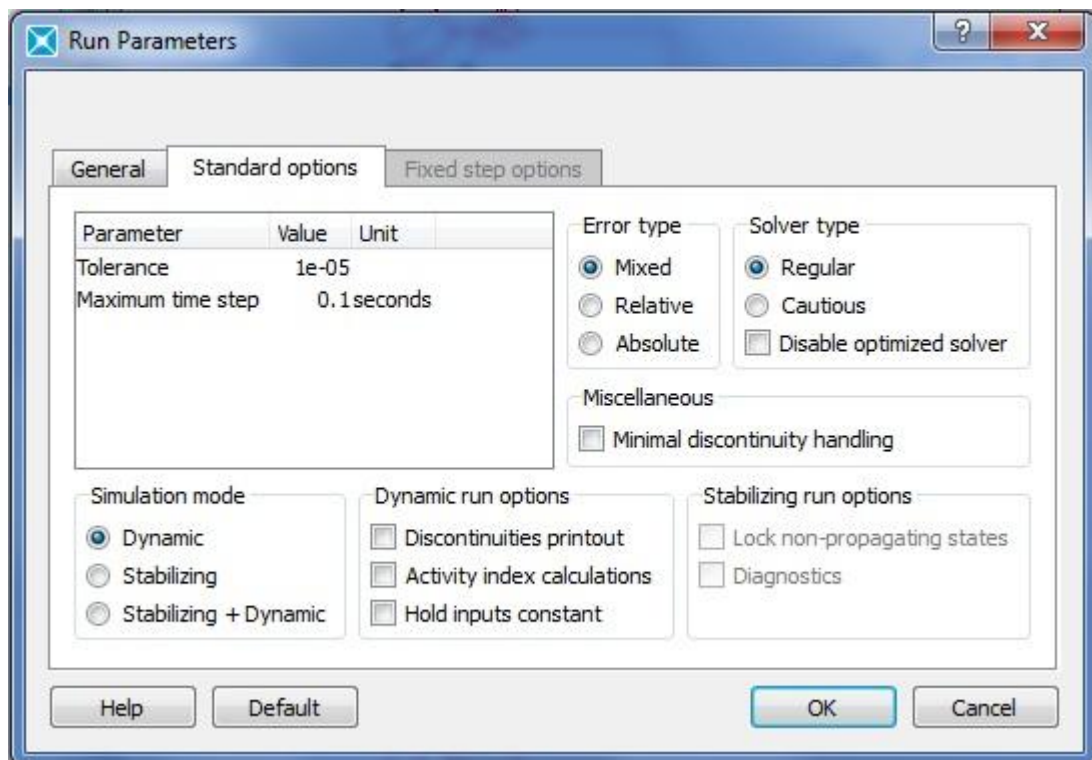
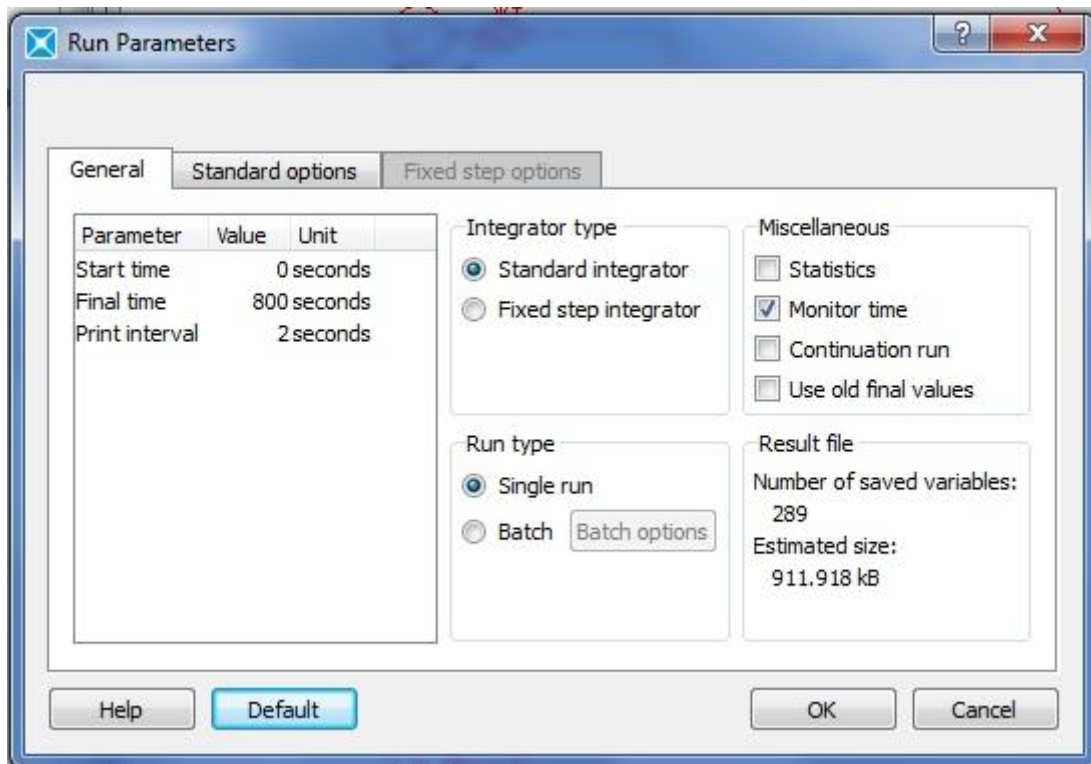
#### 2.4. Simulation mode

Przejdzie do tego trybu uaktywnia nowe menu przedstawione na rys. 6.



Rys. 6. Menu symulacji

Parametry symulacji:



Po wprowadzeniu parametrów uruchamiamy symulację.

## 2.5 Wyniki symulacji

Głównym zagadnieniem przeprowadzenia symulacji jest wpływ zawartości  $O_2$  w gazach spalinowych na konwersję  $CO$ ,  $HC$ ,  $NO_x$ . Zawartość  $O_2$  przed reaktorem zawiera się w przedziale od 6% do 0,01%, co odpowiada wartościom do wprowadzenia do programu równą 0,01 do 0,00001. Wynikiem symulacji są wykresy  $CO$ ,  $HC$ ,  $NO_x$  (ppm) dla trzech stężeń  $O_2$ . Każdy z parametrów należy umieścić na osobnym wykresie nakładając na siebie przebiegi w zależności od zawartości tlenu. Aby uzyskać wykresy należy kliknąć dwa razy na wybrany element, w tym wypadku analizator za reaktorem, następnie wybrać interesujący nas parametr w „**in ppm of dry gases**” i wcisnąć klawisz **plot**. Pojawia się wykres poglądowy, aby zgrać dane do dalszego wykorzystania np.: w EXCELU trzeba z menu wykresu - zakładka **File** użyć opcji **Save data** i zapisać plik z danymi. Zapisany plik o rozszerzeniu .dat jest plikiem tekstowym i można go importować do dowolnego programu obróbki danych.