

Model obliczeniowy do analizy stanów nieustalonych wielofunkcyjnego trzysekcyjnego reaktora katalitycznego

ANTONI ŚWIĄTEK

Ośrodek Badawczo Rozwojowy BOSMAL w Bielsku — Białej

W artykule przedstawiono dwuwymiarowy model do symulacji pola temperatury i zawartości składników spalin w wielofunkcyjnym i wielosekcyjnym reaktorze katalitycznym w stanach nieustalonych i ustalonych. Model ten uwzględnia zjawiska konwekcyjnej wymiany ciepła, wymiany masy w fazie stałej i gazowej, osiowe i promieniowe przewodzenie ciepła w monolicie oraz reakcje chemiczne i wyzwolone podczas reakcji ciepło. Model wykorzystano do analizy stanów przejściowych w osiowoosymetrycznym wielofunkcyjnym trzysekcyjnym reaktorze katalitycznym z wkładem ceramicznym podczas nagrzewania. Zaprezentowano model matematyczny i obliczeniowy oraz wyniki wspólnych obliczeń dla prezentowanego układu.

1. Wprowadzenie

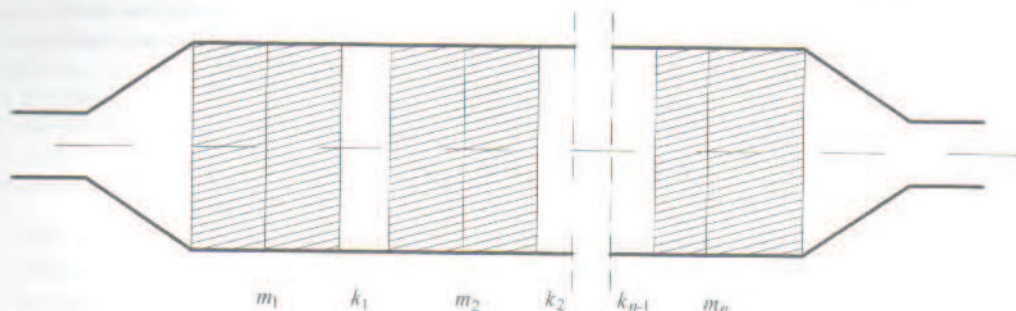
Powszechne obecnie wymagania dotyczące ochrony środowiska wpływają na ustawodawstwo dotyczące emisji szkodliwych substancji ze spalinami silników pojazdów samochodowych. Spełnienie zwiększanych wymagań prawnych jest możliwe poprzez ograniczenie emisji w warunkach zimnego rozruchu silnika oraz przyśpieszania pojazdu. Można to osiągnąć poprzez zmniejszenie emisji ze spalinami silnika i zwiększenie stopnia skuteczności działania reaktora katalitycznego. Skuteczność działania reaktora katalitycznego zależy zarówno od konstrukcji reaktora katalitycznego, jak i konstrukcji układu wylotowego silnika, w tym od miejsca umieszczenia reaktora katalitycznego oraz algorytmu sterowania i zasilania silnika. Rozwój i konstrukcja reaktorów katalitycznych wymagają określenia pola temperatury i zawartości składników spalin wewnątrz reaktora katalitycznego w warunkach ustalonych oraz nieustalonych, w tym podczas nagrzewania. Jednakże badania doświadczalne są bardzo kosztowne i wymagają znacznego nakładu pracy i czasu. Obecnie obok klasycznych trójfunkcyjnych reaktorów katalitycznych stosowanych powszechnie w pojazdach z silnikami o ZI, stosuje się rozruchowe reaktory katalityczne (często podgrzewane elektrycznie). Innym sposobem zmniejszenia emisji jest zastosowanie w układzie wylotowym silnika o ZI wielosekcyjnego reaktora katalitycznego. Poszczególne sekcje różnią się koncentracją substancji katalitycznych oraz parametrami konstrukcyjnymi. Jedną z efektywnych metod wspoma-

gających proces projektowania reaktorów katalitycznych i umożliwiających właściwy dobór ich parametrów jest opracowanie modelu matematycznego reaktora katalitycznego. Po weryfikacji modelu można bowiem na drodze obliczeń numerycznych dobrać optymalne dla konkretnego zastosowania parametry reaktora katalitycznego bez konieczności każdorazowego wykonywania prototypu. Analiza obliczeniowa jest efektywną metodą analizy zjawisk przejściowych. Większość dotychczasowych prac koncentrowała się głównie na określeniu pola temperatury [1, 2, 3]. W niniejszej pracy przedstawiono dwuwymiarowy, osiowoosymetryczny model matematyczny pozwalający na określenie pola temperatury i zawartości składników spalin wewnątrz wielosekcyjnego reaktora katalitycznego. Przedstawiono wyniki obliczeń numerycznych dla reaktora katalitycznego składającego się z trzech sekcji.

2. Założenia do modelu fizycznego

Opracowując model fizyczny przyjęto następujące założenia:

- Układ składa się z n wkładów katalitycznych (nazywanych monolitami i oznaczonych $m_1 + m_n$) oraz $n - 1$ komór, w których następuje mieszanie przepływających gazów (oznaczonych $k_1 + k_{n-1}$). Schemat reaktora katalitycznego przedstawiono na rys. 1.



Rys. 1. Schemat wielosekcyjnego reaktora katalitycznego.

Fig. 1. Multi — section catalytic converter.

- Przekrój monolitu o numerze l jest cylindryczny, zjawiska zachodzące w reaktorze katalitycznym opisano w oparciu o model osiowoosymetryczny dwuwymiarowy.
- Czynnikiem przepływającym przez reaktor katalityczny są spaliny traktowane jako gaz półdoskonały.
- Rozpatrywane procesy odpowiadają rozruchowi zimnego silnika. Przyjmuje się, że temperatura spalin w miejscu napływu do monolitu jest funkcją czasu a ich prędkość jest funkcją odległości od osi reaktora katalitycznego.
- Spaliny zawierają: tlen O_2 , azot N_2 , parę wodną H_2O , dwutlenek węgla CO_2 , tlenek węgla CO , węglowodory CH , tlenki azotu NO_x i wodór H_2 . Składniki podlegające reakcjom chemicznym to tlen, tlenek węgla, węglowodory i wodór. Reakcje chemiczne zachodzą tylko na powierzchni ścianek monolitu. Prędkość reakcji została określona za pomocą równań Arrheniusa. Nie uwzględniono reakcji

reakcji tlenków azotu. Utlenianie węglowodorów opisano reakcją utleniania propylenu C_3H_6 [1, 4, 5].

• Pominięto osiową dyfuzję masy i wymiany ciepła w fazie gazowej. Założono brak wymiany ciepła pomiędzy obudową i otoczeniem.

3. Równania modelu matematycznego

Uwzględniając przyjęte założenia, podstawowe równania opisujące zjawiska w reaktorze katalitycznym mają postać [1, 5, 6]:

$$(1 - \sigma_l) \rho_{w,l} \cdot c_{pw,l} \cdot \frac{\partial T_{w,l}}{\partial t} = \lambda_{wr,l} \left(\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial T_{w,l}}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_{w,l}}{\partial r^2} \right) + \lambda_{wz,l} \cdot \frac{\partial^2 T_{w,l}}{\partial z^2} + s_{geo,l} (T_{g,l} - T_{w,l}) + Q_{cr,l}, \quad (1)$$

$$\rho_{g,l} \cdot v_{g,l} \cdot c_{pg,l} \cdot \frac{\partial T_{g,l}}{\partial z} = s_{geo,l} \cdot h_{z,l} (T_{w,l} - T_{g,l}), \quad (2)$$

$$Q_{c,r} = s_{cat} \cdot \sum_{i=1}^{n_g} (-\Delta H_i) \cdot R_i(c_{w,i}, T_w), \quad (3)$$

$$v_{g,i} \cdot \frac{\partial c_{g,i}}{\partial z} = k_{m,i} \cdot s_{geo,i} \cdot (c_{g,i} - c_{w,i}), \quad (4)$$

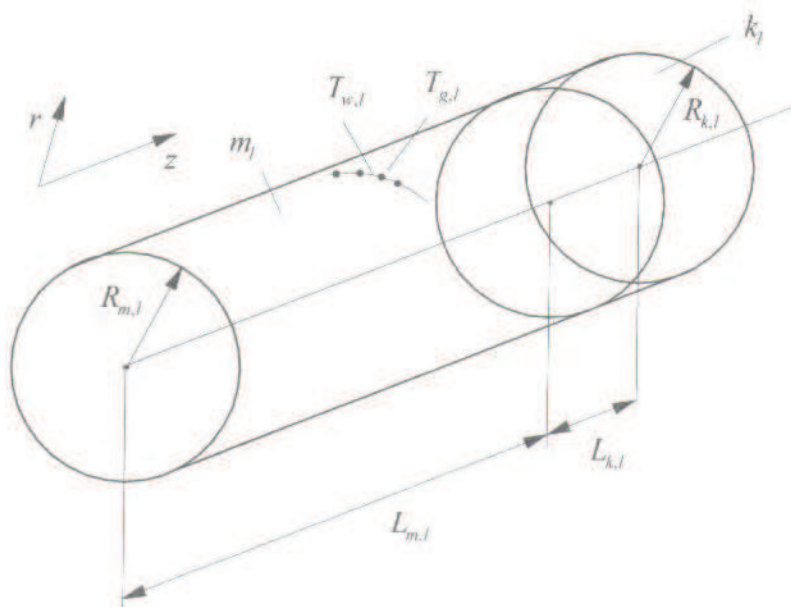
$$s_{cat,i} \cdot R_i = \frac{\rho_{g,i}}{M} \cdot k_{m,i} \cdot s_{geo,i} \cdot (c_{w,i} - c_{g,i}), \quad (5)$$

- Legenda:*
- z, r — współrzędna [m]
 - t — czas [s]
 - T_w — temperatura ścianek monolitu [K];
 - T_g — temperatura gazu w monolicie [K];
 - σ_l — współczynnik wypełnienia monolitu;
 - ρ_w — gęstość materiału monolitu [kg/m^3];
 - c_{pw} — ciepło właściwe materiału monolitu [$\text{J}/(\text{kg K})$];
 - λ_w — współczynnik przewodności cieplnej materiału monolitu [$\text{W}/(\text{m K})$];
 - s_{cat} — czynna powierzchnia jednostkowa monolitu [m^2/m^3];
 - Q_{cr} — wydatek jednostkowy ciepła reakcji egzotermicznych [$\text{J}/(\text{m}^3 \text{ s})$];
 - ρ_g — gęstość spalin [kg/m^3];
 - v_g — prędkość spalin [m/s];
 - c_{pg} — ciepło właściwe spalin [$\text{J}/(\text{kg K})$];
 - $h_{z,l}$ — współczynnik wymiany ciepła [$\text{W}/(\text{m}^2 \text{ s})$];

- s_{cat} — parametr określający powierzchnię jednostkową substancji katalitycznych [m^2/m^3];
 $(-\Delta H_i)$ — ciepło reakcji składnika i [J/mol];
 n_s — liczba analizowanych reakcji zachodzących w reaktorze katalitycznym;
 $c_{g,i}$ — koncentracja składnika i w spalinach [udziały molowe];
 $c_{w,i}$ — koncentracja składnika i na ścianie monolitu [udziały molowe];
 M — masa molekularna spalin [g/mol];
 $k_{m,i}$ — współczynnik wymiany masy składnika [m/s];
 R_i — prędkość reakcji składnika i [mol/(m^2 s)];

Równania (1) i (2) opisują rozkład temperatury gazu i wkładu (monolitu), równania (4) i (5) opisują rozkład koncentracji składników spalin, równanie (3) opisuje ciepło wydzielane w czasie reakcji chemicznych.

Rysunek 2 przedstawia stosowane pozostałe oznaczenia.



Rys. 2. Element monolitu reaktora katalitycznego oraz komora o numerze 1.
 Fig. 2. Denotations — catalytic insert and chamber marked with number 1.

4. Zależności uzupełniające

Ponadto przyjmuje się, że dla gazu przepływającego przez kanały monolitu obowiązują zależności [5]:

- równanie ciągłości:

$$A_l \cdot \rho_{g,l} \cdot v_l = \text{const} \quad (6)$$

gdzie: A — przekrój kanału; $\rho_{g,l}$ — gęstość gazu; v_l — prędkość gazu;

• równanie Clapeyrona:

$$p_l = \rho_{g,l} \cdot R \cdot T_{g,l}, \quad (7)$$

gdzie R — stała gazowa.

Przy założeniu, że spadek ciśnienia przy przepływie przez kanały monolitu jest pomijalny, otrzymuje się:

$$p_l = p_{l,0} = \text{const} \quad (8)$$

Jeśli przyjąć, że w całej komorze l uśrednione wartości temperatury, gęstości, prędkości wzdłuż osi oraz ciśnienia określają parametry $T_{k,l}$, $\rho_{k,l}$, $v_{k,l}$, $p_{k,l}$ to wartości te można obliczyć z prostych zależności przedstawionych w pracy [7].

Niezależność parametrów $T_{k,l}$, $\rho_{k,l}$, $v_{k,l}$, $p_{k,l}$ od r i z opisujących temperaturę, gęstość, prędkość i ciśnienie w komorach, powoduje jednak, że wielkości te określają „średnio” warunki brzegowe ($z=0$) dla gazu wpływającego do monolitu $l+1$. W pracy [7] podano szczegółowo wzory na wyrażenie:

($j=0, \dots, n_{j-1}$):

$$\begin{aligned} T_{g,l+1,j} &= T_{g,l+1} \Big|_{z=0} = T_{l+1,0}, \\ \rho_{g,l+1,j} &= \rho_{g,l+1} \Big|_{z=0} = \rho_{l+1,0}, \\ v_{g,l+1,j} &= v_{g,l+1} \Big|_{z=0} = v_{l+1,0}, \\ p_{g,l+1,j} &= p_{g,l+1} \Big|_{z=0} = p_{l+1,0}. \end{aligned} \quad (9)$$

Warunki brzegowe dla monolitu (dla układu n segmentowego) są następujące [2, 3]:

$$\frac{\partial T_{w,l}}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \quad l=1, \dots, n, \quad (10.1)$$

$$\frac{\partial T_{w,l}}{\partial r} \Big|_{r=R_l} = \alpha_{R,l} (T_{w,l} \Big|_{r=R_l}) \quad l=1, \dots, n, \quad (10.2)$$

$$\frac{\partial T_{w,l}}{\partial r} \Big|_{r=0} = \beta_{l,0} (T_{w,l} \Big|_{z=0}) \quad l=1, \dots, n, \quad (10.3)$$

$$\frac{\partial T_{w,l}}{\partial r} \Big|_{r=L_l} = \beta_{l,L} (T_{w,l}, T_{k,l}) \quad l=1, \dots, n, \quad (10.4)$$

Natomiast warunki brzegowe dla gazu przepływającego przez kanały monolitu przyjęto w postaci [2, 3]:

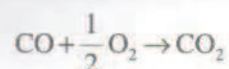
$$T_{g,l}|_{z=0} = T(r, t) \quad (11.1)$$

$$T_{g,l}|_{z=L} = T_{l,0} \quad \text{dla } l=2, \dots, n, \quad (11.2)$$

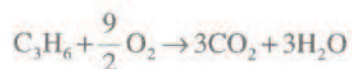
gdzie $T_{l,0}$ — określone w (9); $T_g(r, t)$ — zależność przedstawiająca przebieg temperatury spalin w miejscu napływu do monolitu w funkcji czasu t i promienia r (rys. 5).

Warunki początkowe, mogą być przyjęte jako odpowiadające reaktorowi katalitycznemu, przez który przepływa powietrze o temperaturze otoczenia.

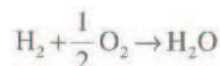
Przyjęto, że w reaktorze katalitycznym zachodzą egzotermiczne reakcje utleniania [4]:



$$\Delta H_{\text{CO}} = -2,832 \cdot 10^5 \text{ J/mol}$$



$$\Delta H_{\text{CH}} = -1,928 \cdot 10^6 \text{ J/mol}$$



$$\Delta H_{\text{H}} = -2,420 \cdot 10^5 \text{ J/mol}$$

Prędkość reakcji składnika i R_i została wyrażona jako funkcja zawartości tego składnika na ścianie monolitu $c_{w,i}$ oraz temperatury monolitu T_w [1]:

$i=1, \text{CO}$

$$R_1 = k_1 \cdot c_{w\text{CO}} \cdot c_{w\text{O}_2} / G; \quad (12.1)$$

$i=2, \text{C}_3\text{H}_3$

$$R_2 = k_2 \cdot c_{w\text{C}_3\text{H}_3} \cdot c_{w\text{O}_2} / G; \quad (12.2)$$

$i=3, \text{H}_2$

$$R_3 = k_1 \cdot c_{w\text{H}_2} \cdot c_{w\text{O}_2} / G, \quad (12.3)$$

gdzie k_i — współczynnik reakcji składnika i [mol K/m² s]; $k_1 = 6,699 \cdot 10^9 \exp(-12555/T_w)$; $k_2 = 1,392 \cdot 10^{11} \exp(-14556/T_w)$; $G = T_w \cdot (1 + K_1 \cdot c_{wCO} + K_2 \cdot c_{wC_3H_8})^2 \cdot (1 + K_3 \cdot c_{wCO}^2 + K_2 \cdot c_{wC_3H_8}^2) \cdot (1 + K_4 \cdot c_{wNO_x}^{0,7})$; $K_1 = 65,6 \exp(961/T_w)$; $K_2 = 2,08 \cdot 10^3 \exp(361/T_w)$; $K_3 = 3,98 \exp(11611/T_w)$; $K_4 = 4,79 \cdot 10^5 \exp(-3733/T_w)$.

W wyniku zachodzących reakcji utleniania składników spalin musi być spełniony bilans udziału masowego tlenu w obrębie reaktora katalitycznego:

$i=4, O_2$

$$R_4 = 0,5 R_1 + 4,5 R_2 + 0,5 R_3. \quad (13)$$

Współczynnik wymiany masy składnika i $k_{m,i}$ w równaniu (2) i (3) określono wyrażeniem [6, 8]:

$$k_{m,i} = \frac{Sh \cdot D_i}{d}, \quad (14)$$

gdzie: Sh — liczba Sherwooda; d — średnica hydrauliczna kanału [cm]; D_i — dyfuzyjność składnika i [cm²/s]; $D_{CO} = 1,3320$ cm²/s; $D_{C_3H_8} = 0,8095$ cm²/s; $D_{H_2} = 5,1863$ cm²/s; $D_{O_2} = 1,3541$ cm²/s;

$$Sh = 0,705 \left(Re \frac{d}{l} \right)^{0,43} \cdot Sc^{0,56},$$

gdzie Re — liczba Reynoldsa; l — długość kanału [m]; Sc — liczba Schmidta;

$$Sc = \frac{\nu}{D}$$

gdzie: ν — współczynnik lepkości kinematycznej [m²/s]; D — dyfuzyjność składnika [m²/s].

$$Re = \frac{v_g \cdot d}{\nu}$$

gdzie: v_g — prędkość gazu [m/s], pozostałe jak wyżej.

5. Model obliczeniowy

W niniejszej pracy do rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych (1), (2) oraz (4) i (5) zastosowano metodę różnic skończonych w wersji zwanej schematem jawnym. Poniżej przedstawiono opis metody dyskretyzacji zagadnienia i algorytmu obliczeń numerycznych.

Przy przyjęciu oznaczeń:

$$g_l(r, z, t) = T_{g,l}(r, z, t) \quad (15.1)$$

$$w_l(r, z, t) = T_{w,l}(r, z, t) \quad (15.2)$$

$$c_l^{(s)}(r, z, t) = c_{gs,l}(r, z, t) \quad (15.3)$$

$$e_l^{(s)}(r, z, t) = c_{ws,l}(r, z, t) \quad (15.4)$$

dla $s = 1, \dots, n$; $l = 1, \dots, n$
oraz:

$$\left. \begin{aligned} a_l &= \rho_{g,l} \cdot v_{g,l} \cdot \bar{c}_{pg,l} \\ d_l &= (1 - \delta_l) \rho_{w,l} \cdot \bar{c}_{pw,l} \\ \alpha_l &= \bar{\lambda}_{wr,l} \\ \beta_l &= \bar{\lambda}_{wz,l} \\ \varphi_l^{(s)} &= \frac{km_s \cdot s_{geo}}{v_{gl}} \\ \psi_l^{(s)} &= \frac{s_{cat} \cdot R_s \cdot M}{s_{geo} \cdot km_s \cdot \rho_{gl}} \end{aligned} \right\} \quad (15.5)$$

gdzie:

$$\bar{c}_{pg,l} = c_{pg,l} / (s_{geo,l} \cdot h_{z,l})$$

$$\bar{c}_{pw,l} = c_{pw,l} / (s_{geo,l} \cdot h_{z,l})$$

$$\bar{\lambda}_{wr,l} = \lambda_{wr,l} / (s_{geo,l} \cdot h_{z,l})$$

$$\bar{\lambda}_{wz,l} = \lambda_{wz,l} / (s_{geo,l} \cdot h_{z,l})$$

równania różniczkowe można zapisać w postaci:

$$\left. \begin{aligned}
 a_l \frac{\partial g_l}{\partial z} &= w_l - g_l \\
 d_l \frac{\partial w_l}{\partial t} &= a_l \left[\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial w_l}{\partial r} + \frac{\partial^2 w_l}{\partial r^2} \right] + \beta_l \frac{\partial^2 w_l}{\partial z^2} + g_l - w_l + Q_l \\
 \frac{\partial c_l^{(s)}}{\partial z} &= \varphi_l^{(s)} (e_l^{(s)} - c_l^{(s)}) \\
 e_l^{(s)} &= c_l^{(s)} - \psi_l^{(s)} (w_l, e_l^{(1)}, \dots, e_l^{(n_s)})
 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} l=1, \dots, n \\ s=1, \dots, n_s \end{array} \quad (16)$$

$$w_l = T_{w,l}, \quad g_l = T_{g,l}, \quad a_l = \frac{\rho_{g,l} v_{g,l} c_{g,l}}{S_{geo,l} h_{z,l}}, \quad d_l = \frac{(1 - \sigma_l) \rho_{w,l} c_{p,w,l}}{S_{geo,l}}$$

$$\alpha_l = \frac{\lambda_{wr,l}}{S_{geo,l}}, \quad \beta_l = \frac{\lambda_{wz,l}}{S_{geo,l}}, \quad Q_l = \frac{Q_{cr,l}}{S_{geo,l}}$$

$$c_l^{(s)} = c_{w,l}, \quad e_l^{(s)} = c_{g,l}, \quad \varphi_l^{(s)} = \frac{k_{m,l} S_{geo,l}}{c_{g,l}}$$

$$\psi_l^{(s)} (e_l^{(1)}, \dots, e_l^{(n_s)}) = \frac{M S_{cat,l} R_l}{\rho_{g,l} k_{m,l} S_{geo,l}}$$

Równania (16) stanowiące układ równań różniczkowych cząstkowych i algebraicznych nieliniowych zostaną rozwiązane poprzez zastosowanie metody różnic skończonych oraz metody iteracyjnej Newtona.

Przyjmuje się, że rozwiązanie równań (16) jest znane, gdy znane są wartości:

$$g_{l,i,j} = g_l(r_i, z_j, t) \quad (17.1)$$

$$w_{l,i,j} = w_l(r_i, z_j, t) \quad (17.2)$$

$$c_{l,i,j}^{(s)} = c_l^{(s)}(r_i, z_j, t) \quad (17.3)$$

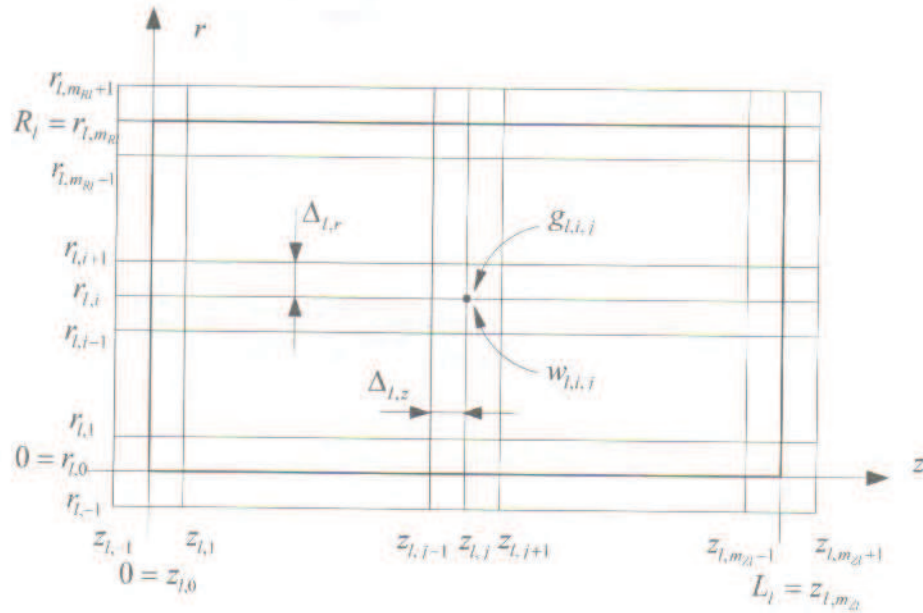
$$e_{l,i,j}^{(s)} = e_l^{(s)}(r_i, z_j, t) \quad (17.4)$$

dla $i=0, 1, \dots, m_{Rl}$; $j=0, 1, \dots, m_{Zl}$; $l=1, \dots, n$; $s=1, \dots, n$
gdzie:

$$r_{l,i} = i \cdot \Delta_{l,r}; \quad \Delta_{l,r} = \frac{R_l}{m_{Rl}};$$

$$z_{l,j} = j \cdot \Delta_{l,z}; \quad \Delta_{l,z} = \frac{L_l}{m_{zl}};$$

m_{Rl}, m_{zl} — przyjęte liczby (rys. 3) definiujące gęstość podziału rozważanego obszaru.



Rys. 3. Punkty dyskretyzacji $r_{l,i}$ oraz $z_{l,j}$.
Fig. 3. Discretization points $r_{l,i}$ and $z_{l,j}$.

Zakłada się również, że dane są warunki początkowe:

$$g_{l,i,j}|_{t=0} = g_{l,i,j}^0 \quad (18.1)$$

$$w_{l,i,j}|_{t=0} = w_{l,i,j}^0 \quad (18.2)$$

$$c_{l,i,j}^{(s)}|_{t=0} = c_{l,i,j,0}^{(s)} \quad (18.3)$$

$$e_{l,i,j}^{(s)}|_{t=0} = e_{l,i,j,0}^{(s)} \quad (18.4)$$

dla $i=0, 1, \dots, m_{Rl}$; $j=0, 1, \dots, m_{zl}$; $l=1, \dots, n$; $s=1, \dots, n_s$; oraz, że warunki brzegowe mają postać:

$$g_l(r, 0, t) = g(r, t) \quad (19)$$

$$\frac{\partial w_l}{\partial r} \Big|_{r=0} = \alpha_{l,0} (w_l|_{r=0}) = 0 \quad (20.1)$$

$$\left. \frac{\partial w_l}{\partial r} \right|_{r=R_l} = \alpha_{l,R} (w_l|_{r=R_l}) \quad (20.2)$$

$$\left. \frac{\partial w_l}{\partial z} \right|_{z=0} = \beta_{l,0} (w_l|_{z=0}) \quad (20.3)$$

$$\left. \frac{\partial w_l}{\partial z} \right|_{z=L_l} = \beta_{l,L} (w_l|_{z=L_l}) \quad (20.4)$$

$$c_l^{(s)}|_{z=0} = c_{l,0}^{(s)} \quad (21)$$

które w zapisie różnic skończonych przyjmują postać:

$$g_{l,i,0} = g_{l,r}(r_i, t) \quad \text{dla} \quad i=0, 1, \dots, m_{Rl} \quad (22)$$

$$\frac{w_{l,i,j} - w_{l,i-1,j}}{2\Delta_{l,r}} = 0 \equiv w_{l,i-1,j} = w_{l,i,j} \quad (23.1)$$

$$\frac{w_{l,m_{Rl}+1,j} - w_{l,m_{Rl}-1,j}}{2\Delta_{l,r}} = \alpha_{l,R} (w_{l,m_{Rl},j}) \equiv w_{l,m_{Rl}+1,j} = w_{l,m_{Rl}-1,j} + 2\Delta_{l,r} \cdot \alpha_{l,R} (w_{l,m_{Rl},j}) \quad (23.2)$$

$$\frac{w_{l,i,1} - w_{l,i,-1}}{2\Delta_{l,z}} = \beta_{l,0} (w_{l,i,0}) \equiv w_{l,i,-1} = w_{l,i,1} + 2\Delta_{l,z} \cdot \beta_{l,0} (w_{l,i,0}) \quad (23.3)$$

$$\frac{w_{l,m_{Zl}+1,j} - w_{l,m_{Zl}-1,j}}{2\Delta_{l,z}} = \beta_{l,L} (w_{l,m_{Zl},j}) \equiv w_{l,m_{Zl}+1,j} = w_{l,m_{Zl}-1,j} + 2\Delta_{l,z} \cdot \beta_{l,L} (w_{l,m_{Zl},j}) \quad (23.4)$$

$$c_{l,i,0}^{(s)} = c_{l,0}^{(s)} \quad (24)$$

gdzie $i=0, 1, \dots, m_{Rl}$; $j=0, 1, \dots, m_{Zl}$; $s=1, \dots, n_s$.

Pierwsze z równań (16) można zapisać w różnicach skończonych następująco:

A. Równanie dla $j=0$:

$$a_{l,i,0} \frac{g_{l,i,1} - g_{l,i,0}}{\Delta_{l,z}} = w_{l,i,0} - g_{l,i,0} \leftarrow \text{różnica skończona w przód} \quad (25.1)$$

B. Równanie dla $j=1, \dots, m_{Zl}-1$:

$$a_{l,i,j} \frac{g_{l,i,j+1} - g_{l,i,j-1}}{2\Delta_{l,z}} = w_{l,i,j} - g_{l,i,j} \leftarrow \text{różnica skończona centralna.} \quad (25.2)$$

Ponieważ dane są $g_{l,i,0}$ ze wzoru (22) formuła (25.1) umożliwia wyznaczenie:

$$g_{l,i,1} = g_{l,i,0} + \frac{\Delta_{l,z}}{a_{l,i,0}} (w_{l,i,0} - g_{l,i,0}) \quad \text{dla } i=0, \dots, m_{Rl}; \text{ z błędem } o(\Delta_z). \quad (26.1)$$

Natomiast ze wzoru (25.2) można dla $j=1, \dots, m_{Zl}-1$ wyznaczyć wartości;

$$g_{l,i,1+1} = g_{l,i,1-1} + \frac{2\Delta_{l,z}}{a_{l,i,j}} (w_{l,i,j} - g_{l,i,j}) \quad \text{dla } i=0, \dots, m_{Rl}; \text{ z błędem } o(\Delta_{l,z})^2. \quad (26.2)$$

Znajomość $g_{l,i,0}$ (z warunku brzegowego (22)) umożliwia wyznaczenie $g_{l,i,1}$ ze wzoru (26.1). Znając $g_{l,i,0}$ i $g_{l,i,1}$ można obliczać $g_{l,i,2}, \dots, g_{l,i,m_{Zl}}$ ze wzoru (26.2).

Drugie równanie z (16) można w różnicach skończonych zapisać następująco:

$$d_{l,i,j} \cdot \dot{w}_{l,i,j} = \alpha_{l,i,j} \left[\frac{1}{r_{l,i}} \frac{w_{l,i+1,j} - w_{l,i-1,j}}{2\Delta_{l,r}} + \frac{w_{l,i+1,j} - 2w_{l,i,j} + w_{l,i-1,j}}{\Delta_{l,r}^2} \right] + \beta_{l,i,j} \frac{w_{l,i+1,j} - 2w_{l,i,j} + w_{l,i-1,j}}{\Delta_{l,z}^2} + g_{l,i,j} - w_{l,i,j} + Q_{l,i,j}. \quad (27)$$

Równania (27) są układem równań różniczkowych zwyczajnych względem zmiennej t . Równania te należy napisać dla $i=0, 1, \dots, m_{Rl}; j=0, 1, \dots, m_{Zl}$. Ponieważ $r_{l,0}=0$, więc dla $i=0$ pojawia się osobliwość w pierwszym składniku po prawej stronie równania (27).

Przyjęto więc, że:

$$\frac{1}{r_{l,0}} \frac{w_{l,i,j} - w_{l,i-1,j}}{2\Delta_{l,r}} = 0; \quad j=0, \dots, m_{Zl}. \quad (28)$$

Można to uzasadnić tym, że zgodnie z (23.1) pochodna $\frac{w_{l,i,j} - w_{l,i-1,j}}{2\Delta_{l,r}}$ jest zerem.

Potrzebne przy rozwiązywaniu równań różniczkowych (27) wartości $w_{l,-1,j}, w_{l,m_{Rl}+1,j}, w_{l,i,-1}, w_{l,m_{Zl}+1,j}$, można wyznaczyć zgodnie ze wzorami (23).

Układ równań różniczkowych (27) rozwiązywano przy zastosowaniu schematu jawnego (metoda Eulera), po zastąpieniu pochodnych $\dot{w}_{l,i,j}$ przez różnicę skończoną wprzód:

$$\dot{w}_{l,i,j} = \frac{w_{l,i,j}^+ - w_{l,i,j}^-}{\Delta_t} \quad (29)$$

gdzie:

$$w_{l,i,j}^+ = w_{l,i,j}(t+h)$$

$$w_{l,i,j}^- = w_{l,i,j}(t).$$

Dla wyznaczenia $w_{l,i,j}^+$ otrzymuje się wówczas zależności:

$$w_{l,i,j}^+ = w_{l,i,j}^- + \frac{\Delta_t}{d_{l,i,j}} \left[\left(\alpha_{1,i,j} \frac{1}{r_{l,r}} \frac{w_{l,i+1,j}^- - w_{l,i-1,j}^-}{2\Delta_{l,r}} + \frac{w_{l,i+1,j}^- - 2w_{l,i,j}^- + w_{l,i-1,j}^-}{\Delta_{l,r}^2} \right) \right] + \quad (30)$$

$$+ \beta_{l,i,j} \frac{w_{l,i,j+1}^- - 2w_{l,i,j}^- + w_{l,i,j-1}^-}{\Delta_{l,z}^2} + g_{l,i,j}^- - w_{l,i,j}^- + Q_{l,i,j}^-.$$

Pozostałe równania (16) rozwiązywane są następująco:

Dla warstwy 0 ($j=0$).

Z warunku brzegowego (21) wynika, że:

$$c_{l,i,0}^{(s)} = c_{l,i,0}^{(s)} \quad \text{dla} \quad s=1, \dots, n_s. \quad (31.1)$$

Nacemiast z czwartego z równań (16) otrzymuje się zależności:

$$e_{l,i,0}^{(s)} - c_{l,i,0}^{(s)} + \psi_l^{(s)}(w_{l,i,0}, e_{l,i,0}^{(1)}, \dots, e_{l,i,0}^{(n_s)}) = 0 \quad (31.2)$$

stanowiące układ równań algebraicznych nieliniowych. Rozwiązując ten układ otrzymuje się wartości stężeń na ściankach.

Dla warstw l, \dots, m_{zl} ($j=0, 1, \dots, m_{zl}-1$).

Całkując obie strony trzeciego z równań (16) w przedziale $\langle z_{1,i}, z_{l,j+1} \rangle$ otrzymuje się:

$$c_{l,i,j+1}^{(s)} - c_{l,i,j}^{(s)} = \int_{z_{nj}}^{z_{nj+1}} \varphi_l^{(s)}(e_{l,i}^{(s)} - c_{l,i}^{(s)}) dz. \quad (32)$$

Po przybliżeniu całki występującej po prawej stronie równania (32) polem trapezu uzyskano:

$$c_{l,i,j+1}^{(s)} - c_{l,i,j}^{(s)} = \frac{\varphi_{l,j+1}^{(s)}(e_{l,i,j+1}^{(s)} - c_{l,i,j+1}^{(s)}) + \varphi_{l,i}^{(s)}(e_{l,i,j}^{(s)} - c_{l,i,j}^{(s)})}{2} \cdot \Delta_{l,z}. \quad (33)$$

Z równań (33) można obliczyć $c_{l,i,j+1}^{(s)}$ w funkcji $e_{l,i,j+1}^{(s)}$ oraz $c_{l,i,j}^{(s)}$, $e_{l,i,j}^{(s)}$:

$$c_{l,i,j+1}^{(s)} = \frac{2 \cdot c_{l,i,j}^{(s)} + \varphi_{l,j-1}^{(s)} \cdot e_{l,i,j+1}^{(s)} \cdot \Delta_{l,z} + \varphi_{l,i}^{(s)}(e_{l,i,j}^{(s)} - c_{l,i,j}^{(s)}) \Delta_{l,z}}{2 + \varphi_{l,j+1}^{(s)} \cdot \Delta_{l,z}}. \quad (34)$$

Wstawiając tak określone $c_{l,i,j+1}^{(s)}$ do czwartego z równań (16) otrzymuje się następujący układ n_s równań algebraicznych nieliniowych do rozwiązania:

$$e_{l,i,j+1}^{(s)} = \frac{2 \cdot c_{l,i,j}^{(s)} + \varphi_{l,j+1}^{(s)} \cdot e_{l,i,j+1}^{(s)} \cdot \Delta_{l,z} + \varphi_{l,j}^{(s)} (e_{l,i,j}^{(s)} - c_{l,i,j}^{(s)}) \Delta_{l,z}}{2 + \varphi_{l,j+1}^{(s)} \cdot \Delta_{l,z}} \quad (35)$$

$$+ \psi_l^{(s)} (w_{l,i,j-1}, e_{l,i,j+1}^{(1)}, \dots, e_{l,i,j+1}^{(n_s)}).$$

Do rozwiązania równań (31.2) i (35) zastosowano metodę iteracyjną Newtona. Jako przybliżenie początkowe stężeń $e_{l,i,j+1}^{(s)}$ przyjmowano wartości z poprzedniej chwili czasowej. W chwili początkowej ($t=0$) przyjmowano natomiast, że $e_{l,i,j-1}^{(s)} = c_{l,i,j+1}^{(s)} = c_{l,0}^{(s)}$. Do obliczenia macierzy gradientów stosowano metodę różnic skończonych.

W opisanym powyżej postępowaniu zakłada się, że znane są temperatury ($g_{l,i,j}$), ciśnienia ($p_{l,i,j}$), gęstości ($q_{l,i,j}$), prędkości ($v_{l,i,j}$) i stężenia ($c_{l,i,j}^{(s)}$) wlatującego do monolitu l gazu. Dla pierwszego monolitu, wielkości te są rzeczywiście znane. Natomiast dla monolitów $2, \dots, n$ muszą być one wyznaczone według zależności opisanych w pracy [7], co wymaga wcześniejszego obliczenia wielkości $T_{k,l}$, $p_{k,l}$, $q_{k,l}$ i $v_{k,l}$, a więc temperatury, ciśnienia, gęstości i prędkości gazu przepływającego przez komorę o numerze l .

Podobnie przedstawia się sprawa stężeń zanieczyszczeń gazu. Jeśli przyjąć, że w komorze l uśrednione wartości stężeń określają parametry $c_{k,l}^{(s)}$ ($s=1, \dots, n_s$), to wartości te można obliczyć poprzez porównania strumienia masy zanieczyszczeń wypływających z monolitu l i przepływających przez komorę l , a więc według zależności:

$$A_{k,l} \cdot v_{k,l} \cdot \rho_{k,l} \cdot c_{k,l}^{(s)} = \sum_{i=0}^{n_l} A_{l,i} \cdot v_{l,i} \cdot \rho_{l,i} \cdot c_{l,i}^{(s)} \quad (36)$$

gdzie: $A_{k,l}$, $v_{k,l}$, $\rho_{k,l}$, $A_{l,i}$, $v_{l,i}$, $\rho_{l,i}$ — określone w [7]; $c_{l,i}^{(s)} = c_l^{(s)}$ dla $z=L_{m,l}$ oraz $r=r$. Z zależności (36) otrzymuje się:

$$c_{k,l}^{(s)} = \frac{\sum_{i=0}^{n_l} A_{l,i} \cdot v_{l,i} \cdot \rho_{l,i} \cdot c_{l,i}^{(s)}}{A_{k,l} \cdot v_{k,l} \cdot \rho_{k,l}} \quad s=1, \dots, n_s, \quad (37)$$

Podobnie z bilansu strumienia masy zanieczyszczeń przepływających przez komorę l i wpływających do monolitu $l+1$ otrzymuje się równania:

$$\sum_{i=0}^{n_{l+1}} A_{l+1,i} \cdot v_{l+1,i} \cdot \rho_{l+1,i} \cdot c_{l+1,i}^{(s)} = A_{k,l} \cdot v_{k,l} \cdot \rho_{k,l} \cdot c_{k,l}^{(s)}. \quad (38)$$

Po przyjęciu założenia:

$$c_{l+1,i}^{(s)} = c_{l+1,0}^{(s)} \quad \text{dla} \quad i=1, \dots, n_{l+1} \quad (39)$$

otrzymuje się wzór na stężenia na wlocie do komory $l+1$:

$$c_{l+1,0}^{(s)} = \frac{A_{k,l} \cdot v_{k,l} \cdot \rho_{k,l}}{\sum_{i=0}^{n_{l+1}} A_{l+1,i} \cdot v_{l+1,i} \cdot \rho_{l+1,i}} \cdot c_{k,l}^{(s)} \quad (40)$$

gdzie: $c_{l+1,0}^{(s)}$ — obliczone według (39); $v_{l+1,i}$, $\rho_{l+1,i}$ — obliczone według [7].

Stosowanie tego algorytmu umożliwia obliczenie interesujących projektanta reaktyw katalitycznych wielkości, a w szczególności temperatury, gęstości i prędkości spalin oraz temperatury ścianek. Warto tu zwrócić uwagę ponownie na to, że przyjęty model komory ma właściwości uśredniające.

Zastosowany w niniejszej pracy schemat jawny przy zastosowaniu metody różnic skończonych cechuje się warunkową numeryczną stabilnością. Jego prostota jest więc okupiona tym, że krok całkowania Δ_t nie może być dowolny. Stabilność zachodzi wówczas gdy:

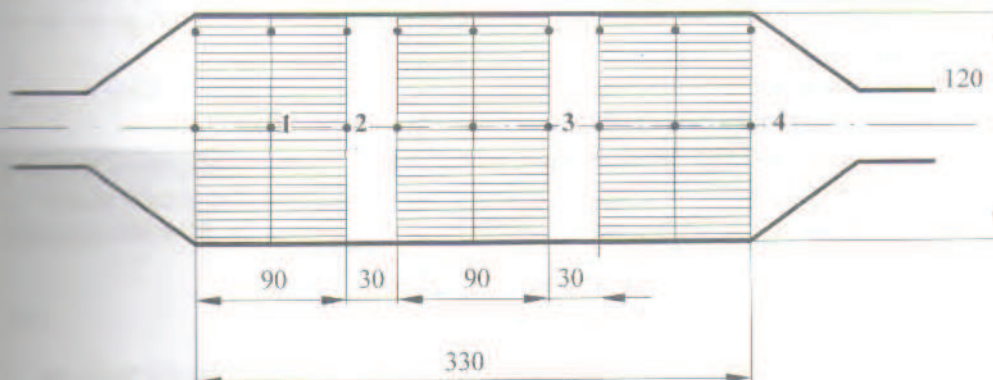
$$\Delta_t < \min_{1 \leq l \leq n} h_l(\Delta_{l,r}, \Delta_{l,z}).$$

Na podstawie modelu matematycznego opracowano program komputerowy w języku Object Pascal z wykorzystaniem platformy Delphi. Szczegółowy opis programu oraz innych do obliczeń przedstawiono w pracach [7, 9].

6. Wyniki obliczeń

W oparciu o opracowany model komputerowy przeprowadzono obliczenia rozkładu temperatury ściany reaktora katalitycznego T_w , zawartości tlenku węgla CO w spalinach oraz zawartość C_3H_6 w spalinach. Wyniki przedstawiono w funkcji czasu bądź dla wybranych chwil czasowych symulacji obliczeniowej opisywanego układu w funkcji zmiennych przestrzennych.

Na rysunku 4 przedstawiono schemat reaktora katalitycznego z wymiarami i punktami obliczeniowymi.



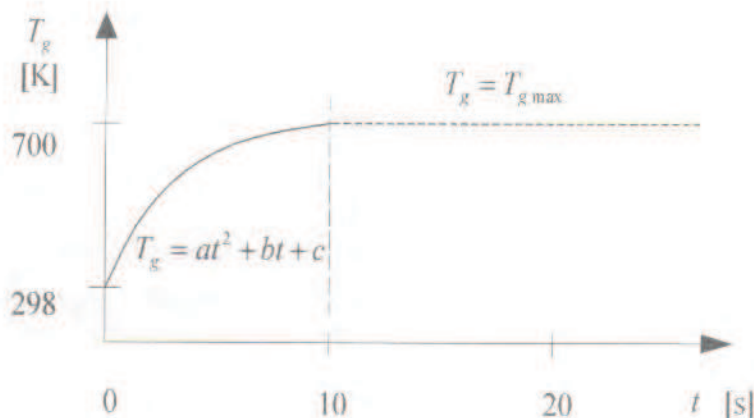
Rys. 4. Schemat reaktora katalitycznego z zaznaczonymi punktami obliczeniowymi.

Fig. 4. Catalytic converter with marked points of the calculations.

W przeprowadzonych obliczeniach przyjęto następujące założenia i dane liczbowe:

- Przyjęto, że spaliny mają skład i wielkości termodynamiczne odpowiadające procesowi spalania przy współczynniku nadmiaru powietrza $\lambda = 1$.
- Przebieg zmiany temperatury w funkcji czasu pracy silnika przyjęto zgodnie z danymi doświadczalnymi.

Na rysunku 5 przedstawiono przykładowy przebieg zmiany temperatury spalin na wlocie do monolitu w funkcji czasu pracy silnika.



Rys. 5. Przebieg temperatury spalin w miejscu napływu do monolitu w zależności od czasu.
Fig. 5. Course of exhaust gas temperature change downstream the monolith.

Istnieje możliwość zdefiniowania dowolnego profilu zmiany temperatury spalin.

W obliczeniach przyjęto:

- temperatura początkowa (spalin, monolitu) 298 K,
- czas przejścia 10 s,
- temperatura maksymalna spalin 700 K.

• Przebieg zmiany prędkości w funkcji odległości od osi reaktora katalitycznego przyjęto zgodnie z danymi doświadczalnymi. Na rysunku 6 przedstawiono przykładowy przebieg zmiany prędkości w miejscu napływu do monolitu w funkcji odległości od osi reaktora katalitycznego.

Istnieje możliwość zdefiniowania dowolnego profilu zmiany prędkości spalin.

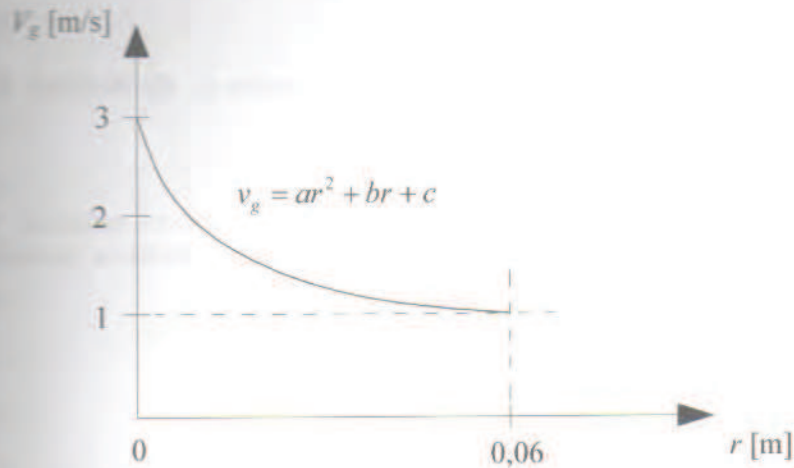
W przedstawionych dalej obliczeniach przyjęto:

- prędkość w osi reaktora katalitycznego 3 m/s,
- prędkość przy obudowie 1 m/s.

• Współczynnik wymiany ciepła pomiędzy spalinami i ścianką monolitu wyznacza się z zależności [8]:

$$h_z = \frac{\text{Nu} \cdot \lambda_g}{d} \quad (41)$$

gdzie: h_z — współczynnik wymiany ciepła [$\text{W}/(\text{m}^2 \text{K})$], Nu — liczba Nusselta, λ_g — współczynnik przewodności cieplnej spalin [$\text{W}/(\text{m K})$], d — średnica hydrauliczna kanału [m].



Wyk. 6. Przebieg zmiany prędkości spalin w miejscu napływu do monolitu w funkcji odległości od osi reaktora katalitycznego.

Fig. 6. Profile of exhaust gas velocity downstream the monolith.

Liczbę Nusselta wyznaczono z zależności [8]:

$$Nu = 0,571 \left(Re \cdot \frac{d}{l} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (41.1)$$

gdzie: Re — liczba Reynoldsa, l — długość kanału [m].

Przyjęto następujące wartości:

- średnica hydrauliczna $d = 0,001$ m.;
- długość kanału $l = 0,09$ m.;
- prędkość spalin $V_g = V_g(r, z, t)$;
- współczynnik lepkości kinematycznej spalin ν_g przyjęto jak dla powietrza i wyznaczono z zależności:

$$\nu_g = \frac{\eta_g}{\rho_g}$$

gdzie: η_g — współczynnik lepkości dynamicznej [N s/m²].

— współczynnik przewodności cieplnej spalin λ_g przyjęto jako dla powietrza i aproksymowano funkcją $\lambda_g = \lambda_g(T_g)$:

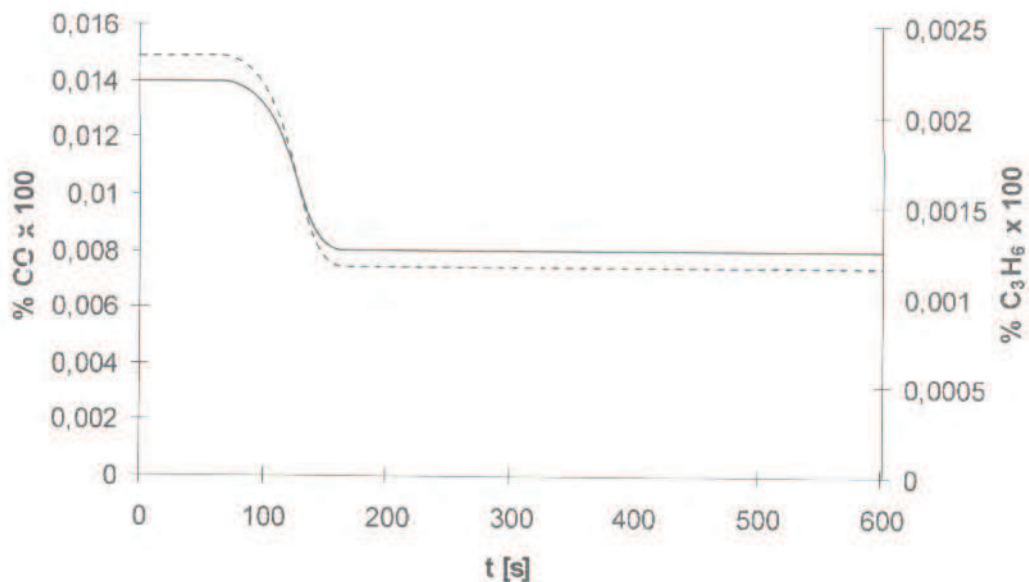
$$\lambda_g = 2,269 \cdot 10^{-4} T_g^{0,832} \text{ [W/(m K)]}.$$

- Wartości pozostałych wielkości przyjęto w oparciu o analizę dostępnej literatury:
- gęstość materiału monolitu ρ_w
 $\rho_w = 2500$ kg/m³,

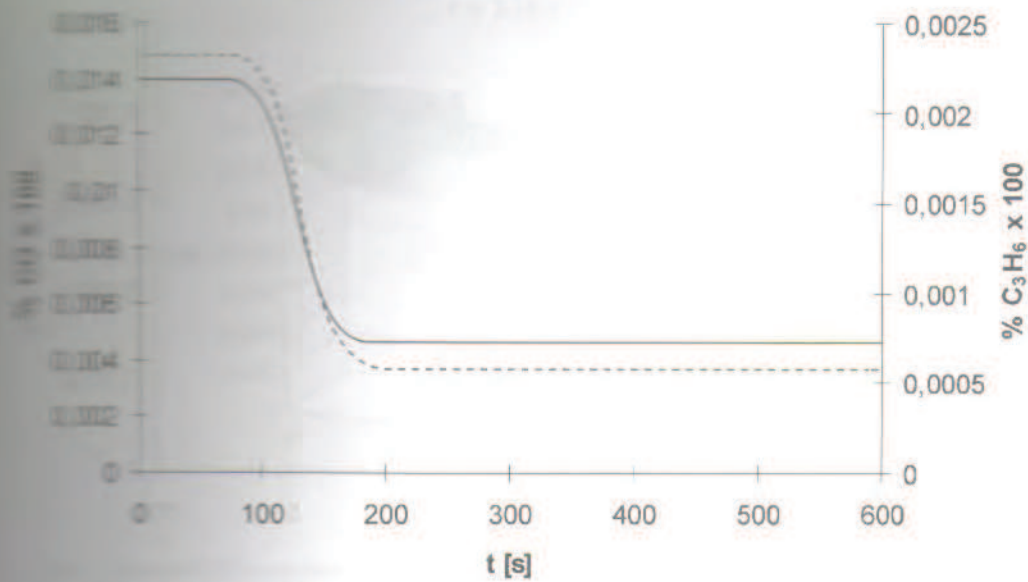
- ciepło właściwe materiału monolitu c_{pw}
 $c_{pw} = 1071 \text{ J}/(\text{kg K})$,
- współczynnik przewodności cieplnej materiału monolitu λ_w dla materiału monolitu ceramicznego:
 $\lambda_{w,r} = 0,27 \text{ W}/(\text{m K})$,
 $\lambda_{w,z} = 0,53 \text{ W}/(\text{m K})$,
- dla monolitu metalowego w programie przygotowano funkcje na podstawie których wyliczono $\lambda_{w,r}$ i $\lambda_{w,z}$ w zależności od geometrii monolitu reaktora katalitycznego i materiału konstrukcyjnego
- parametr określający koncentrację substancji katalitycznych S_{cat}
 $S_{cat} = 25000 \text{ m}^2/\text{m}^3$
- geometryczna powierzchnia odniesiona do objętości S_{geo}
 $S_{geo} = 1000 \text{ m}^2/\text{m}^3$,
- współczynnik wypełnienia monolitu δ
 $\delta = 0,7$.

• Przyjęto, że funkcje α_r , β_r , β_L są tożsamościowo równe zero, co oznacza, że założono izolację termiczną na powierzchni zewnętrznej reaktora katalitycznego oraz na bocznych jego powierzchniach.

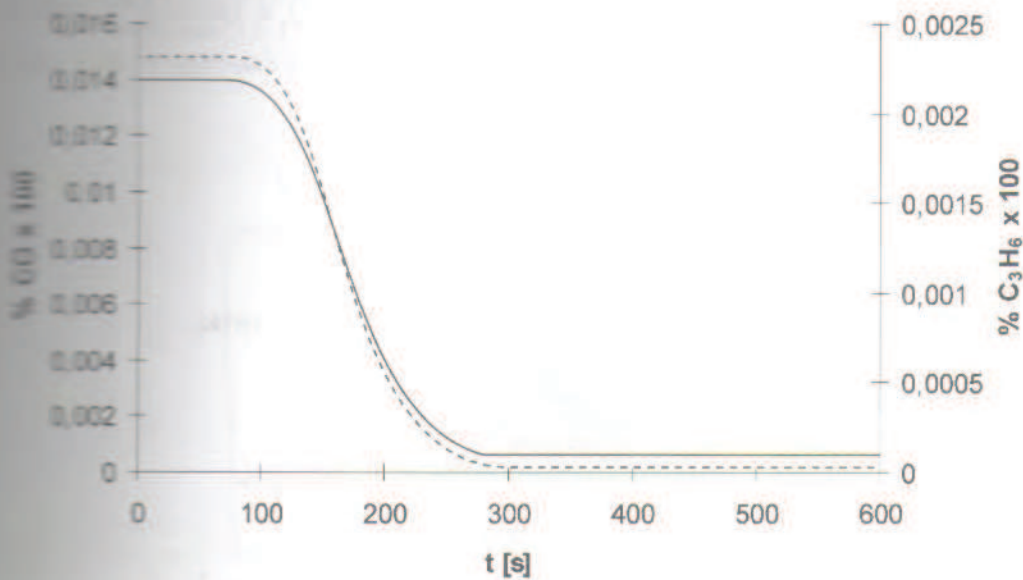
Na rysunkach 7–10 przedstawiono zawartość CO (linia cienka) i C_3H_6 w poszczególnych punktach obliczeniowych reaktora katalitycznego w funkcji czasu pracy reaktora katalitycznego liczonego od uruchomienia silnika.



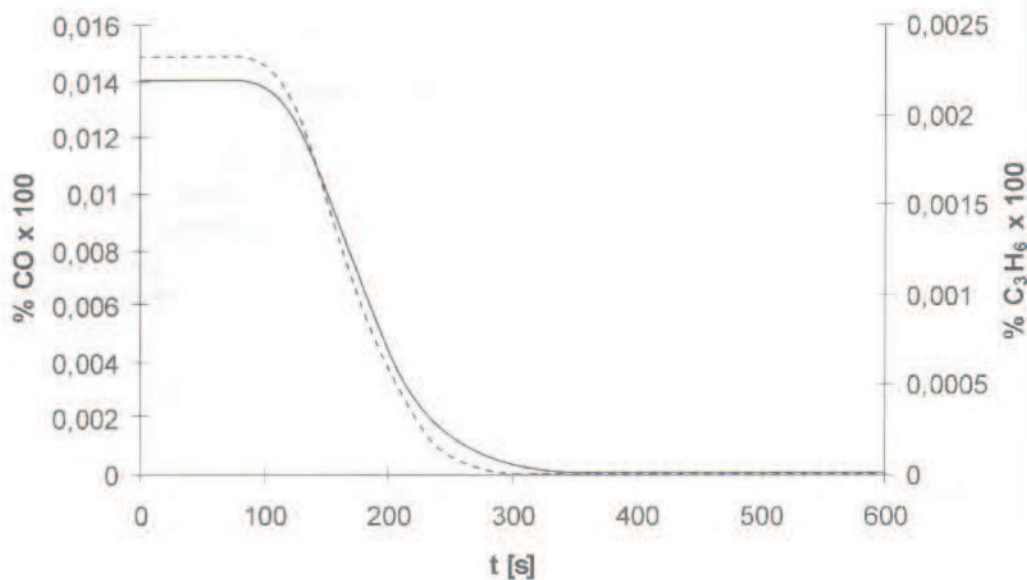
Rys. 7. Zawartość CO i C_3H_6 w spalinach w punkcie 1.
 Fig. 7. Contents of CO and C_3H_6 in exhaust gases at point 1.



Rys. 8. Zawartość CO i C₃H₆ w spalinach w punkcie 2.
 Fig. 8. Contents of CO and C₃H₆ in exhaust gases at point 2.

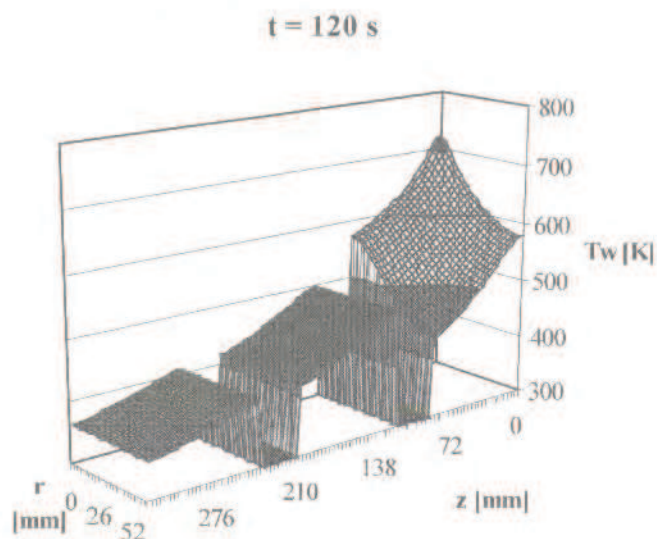


Rys. 9. Zawartość CO i C₃H₆ w spalinach w punkcie 3.
 Fig. 8. Contents of CO and C₃H₆ in exhaust gases at point 3.

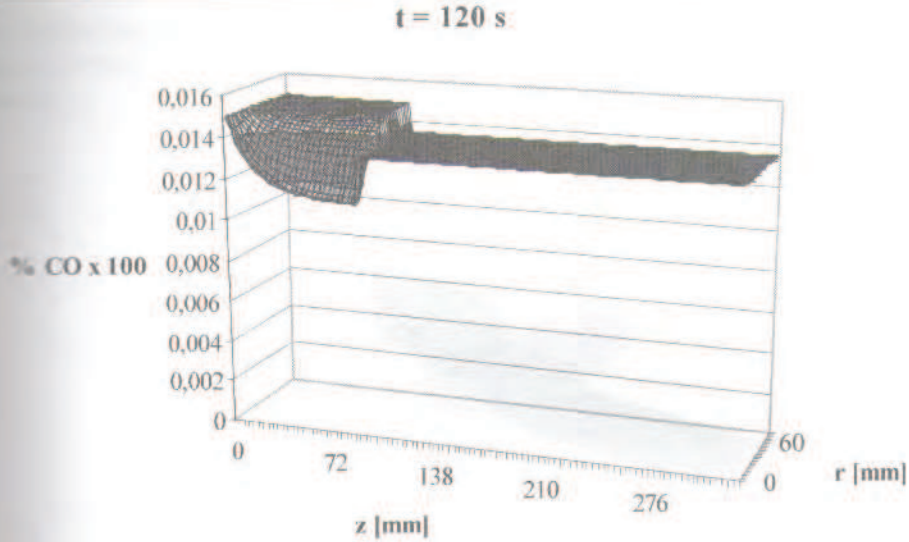


Rys. 10. Zawartość CO i C_3H_6 w spalinach w punkcie 4.
 Fig. 10. Contents of CO and C_3H_6 in exhaust gases at point 4.

Na rysunku 11 przedstawiono rozkład temperatury ścian monolitów w reaktorze katalitycznym po 120 s od uruchomienia silnika. Widoczne na rysunku zagłębienia odpowiadają lokalizacji komór w reaktorze katalitycznym. Na rysunku 12 przedstawiono odpowiadający tej chwili czasowej rozkład zawartości CO w spalinach w funkcji wymiarów reaktora katalitycznego.



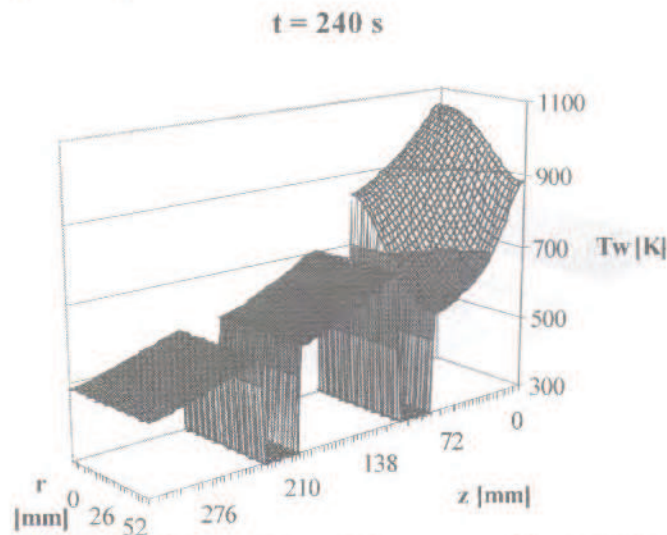
Rys. 11. Temperatura ścian monolitów w reaktorze katalitycznym po 120 s od chwili uruchomienia silnika.
 Fig. 11. Temperature of monolith walls in the catalytic converter after 120 seconds from engine start-up.



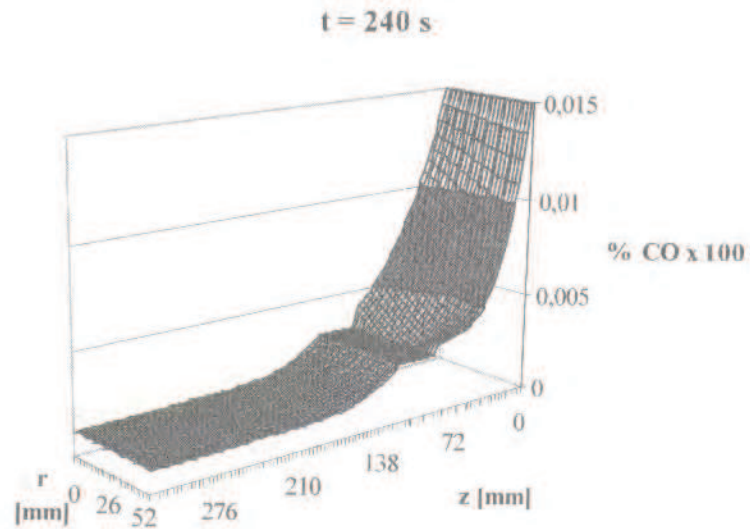
Rys. 12. Zawartość CO w spalinach w reaktorze katalitycznym po 120 s od chwili uruchomienia silnika
 Fig. 12. Contents of CO in the catalytic converter after 120 seconds from engine start-up.

Po 120 s od chwili uruchomienia silnika zaczyna pracować pierwszy monolit modelowanego układu — rys.12. Reakcje utleniania zachodzą najintensywniej w osi reaktora katalitycznego w związku z występującą tam największą temperaturą ścian monolitu z substancją katalityczną. Skuteczność działania całego układu dla tej chwili czasowej wynosi odpowiednio 10% dla CO i około 9% dla C_3H_6 .

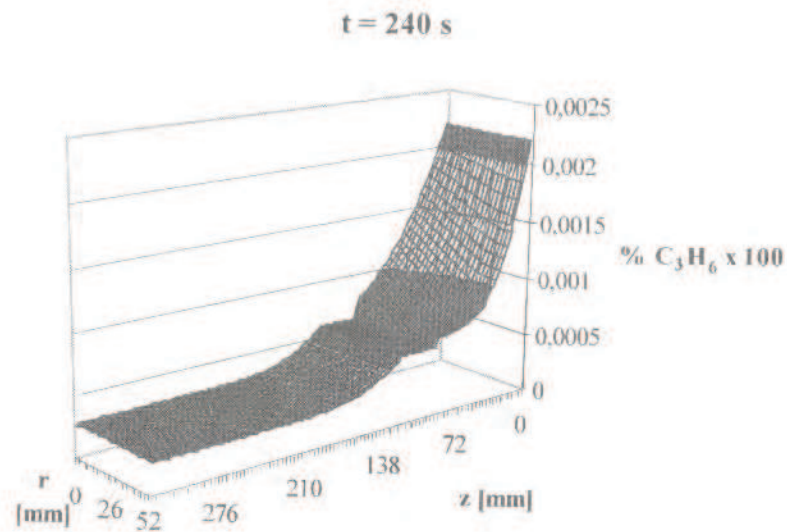
Na rysunkach 13–15 przedstawiono temperaturę ścian monolitów oraz zawartość CO i C_3H_6 w spalinach po 240 s od chwili uruchomienia silnika.



Rys. 13. Temperatura ścian monolitów w reaktorze katalitycznym po 240 s od chwili uruchomienia silnika.
 Fig. 13. Temperature of monolith walls in the catalytic converter after 240 seconds from engine start-up.



Rys. 14. Zawartość CO w spalinach w reaktorze katalitycznym po 240 s od chwili uruchomienia silnika
 Fig. 14. Contents of CO in exhaust gases in the catalytic converter after 240 seconds from engine start-up.



Rys. 15. Zawartość C_3H_6 w spalinach w reaktorze katalitycznym po 240 s od chwili uruchomienia silnika
 Fig. 15. Contents of C_3H_6 in exhaust gases in the catalytic converter after 240 seconds from engine start-up.

Osiągnięcie temperatury roboczej monolitu drugiego wpływa znacząco na osiąganą skuteczność działania układu, która po 240 s od chwili uruchomienia silnika wynosi 92 % dla CO i 88% dla C_3H_6 .

Z kolei na rysunkach 16–18 przedstawiono przebieg temperatury ścian monolitów oraz zawartości CO i C_3H_6 w spalinach po osiągnięciu przez trzeci monolit temperatury bocznej.

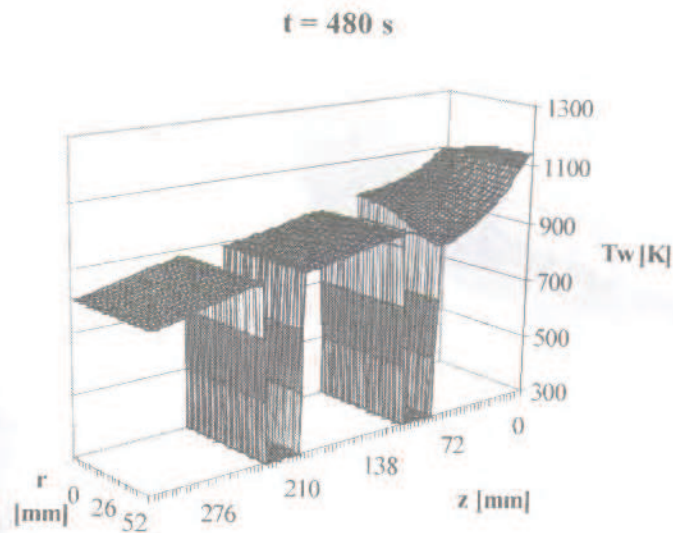


Fig. 16. Temperatura ścian monolitów w reaktorze katalitycznym po 480 s od chwili uruchomienia silnika.
Fig. 16. Temperature of monolith walls in the catalytic converter after 480 seconds from engine start-up.

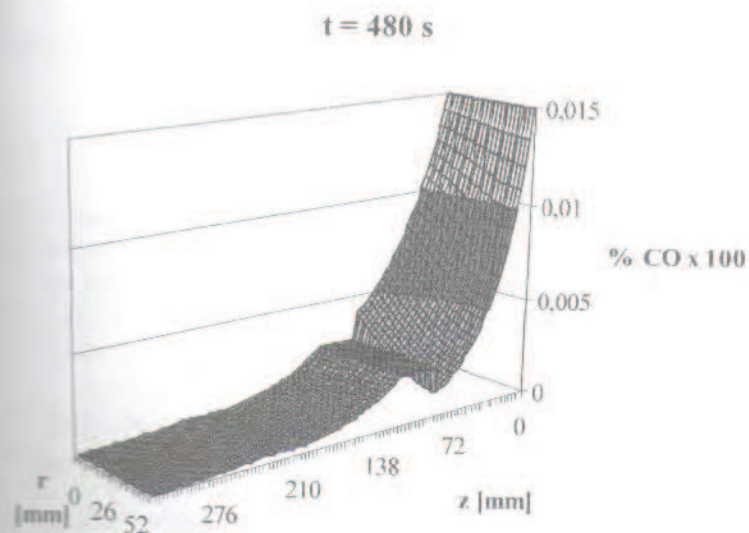
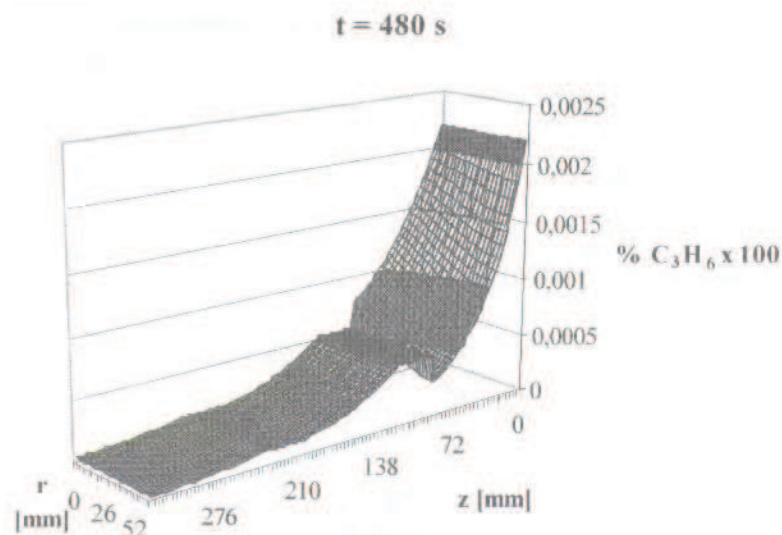


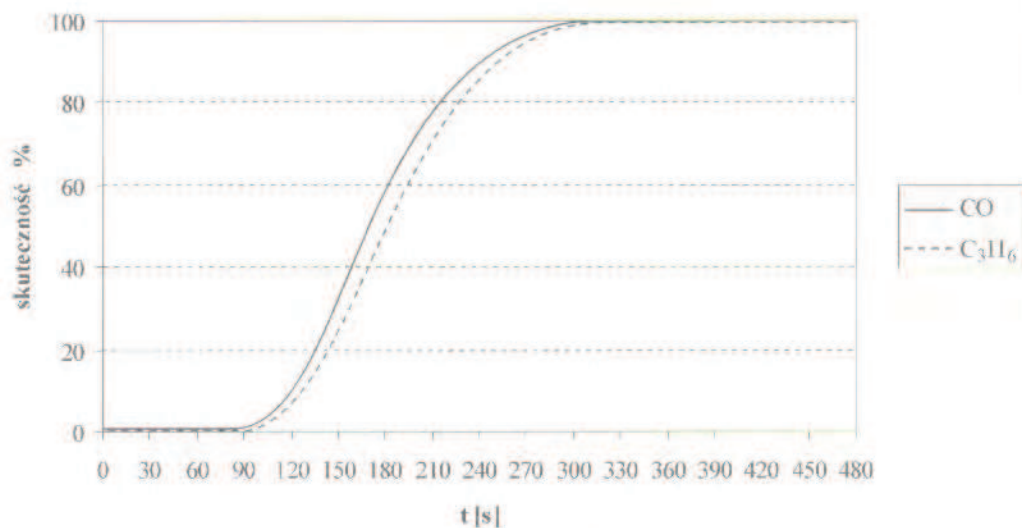
Fig. 17. Zawartość CO w spalinach w reaktorze katalitycznym po 480 s od chwili uruchomienia silnika.
Fig. 17. Contents of CO in exhaust gases in the catalytic converter after 480 seconds from engine start-up.



Rys. 18. Zawartość C_3H_6 w spalinach w reaktorze katalitycznym po 480 s od chwili uruchomienia silnika.
Fig. 18. Contents of C_3H_6 in exhaust gases in the catalytic converter after 480 seconds from engine start-up.

Nagrzewanie się trzeciego z monolitów powoduje utlenianie pozostałych i wymieszanych w drugiej komorze składników spalin i w konsekwencji podnosi skuteczność działania układu do około 99% dla CO i 98% dla C_3H_6 .

Na rysunku 19 przedstawiono skuteczność działania modelowanego układu w funkcji czasu od chwili uruchomienia silnika.



Rys. 19. Skuteczność utleniania CO i C_3H_6 w funkcji czasu pracy reaktora katalitycznego od chwili uruchomienia silnika.

Fig. 19. Efficiency of oxidation of CO and C_3H_6 as a function of time of catalyst operation from engine start-up.

Na rysunku 20 przedstawiono skuteczność działania modelowanego układu w funkcji temperatury reaktora katalitycznego.

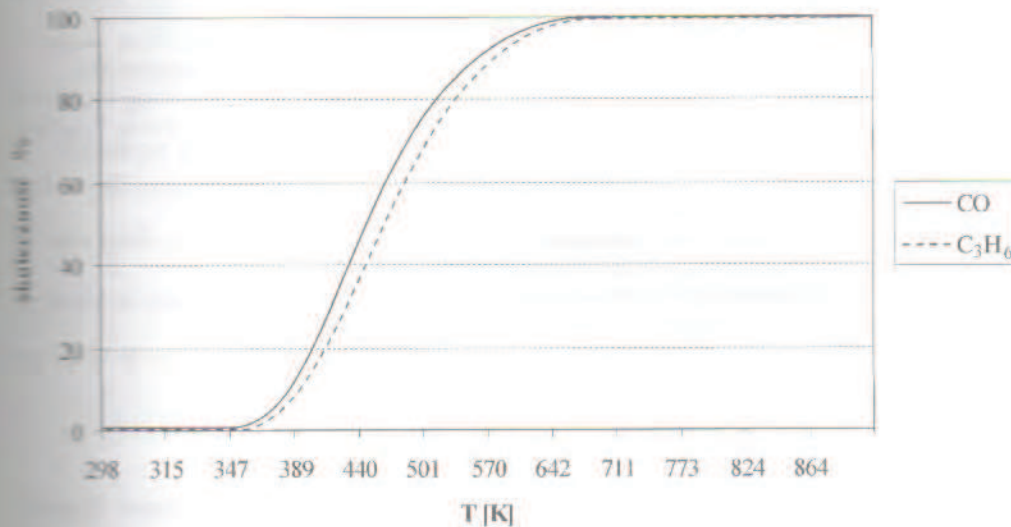


Fig. 20. Skuteczność utleniania CO i C₃H₆ w funkcji temperatury ścianek monolitu reaktora katalitycznego od chwili rozruchu silnika.

Fig. 20. Efficiency of oxidation of CO and C₃H₆ as a function of catalytic converter walls temperature from engine start-up.

Analizując rysunki 19 i 20 można zauważyć prawidłowe odwzorowanie fizycznych procesów zachodzących w reaktorze katalitycznym [1].

7. Podsumowanie

Prezentowany model obliczeniowy i opracowany program komputerowy [7] umożliwia przeprowadzenie obliczeń dla:

- niżej wymienionych warunków początkowych,
- dowolnych składów spalin,
- niżej wymienionych wymiarów geometrycznych poszczególnych sekcji (monolitów i komór),
- układów o 1 do 3 wkładów katalitycznych,
- zmniejszonego pokrycia substancją katalityczną poszczególnych monolitów.

Niezbędne jest przeprowadzenie badań doświadczalnych reaktora katalitycznego, zainstalowanego w układzie wylotowym silnika spalinowego, obejmujących pomiary i rejestrację przebiegu temperatury spalin i ścian monolitów oraz zawartości składników spalin przed i za reaktorem katalitycznym. Badania te pozwolą na weryfikację i ocenę dokładności prezentowanego modelu. Na obecnym etapie porównano otrzymane wyniki z informacjami podanymi w dostępnej literaturze [1, 2, 4].

Literatura

- [1] BABA N., OHSAWA K., SUGIORA S.: *Numerical approach for improving the Conversion Characteristics of Exhaust catalysts Under warming-Up Condition*. SAE 962 076
- [2] CHEN D.K.S., BISSETT J.E., OH S.H., OSTROM D.L.V.: *A three — dimensional model for the analysis of transient thermal and conversion characteristics of monolithic catalytic converters*. SAE 880 282
- [3] OH S.H., CAVENDISH J.C.: *Transient of Monolithic Catalytic Converters: Response to Step Changes In Feedstream Temperature as Related to Controlling Automobile Emissions*. Ind. Eng. Chem. Prod. Res. Dev., Vol.21, No 1, 1982
- [4] MITANIĆ W.: *Termochemiczny model reaktora katalitycznego w układzie wylotowym silnika dwusuwowego*. Journal of KONES 2000, str. 404-414
- [5] PISCHINGER R.: *Thermodynamik der Verbrennungs — Kraftmaschine*. Springer — Verlag, Wien 1989
- [6] PROSNAK W.J.: *Mechanika Płynów*. PWN, Warszawa 1971
- [7] ŚWIĄTEK A., BRZOZOWSKI K.: *Model matematyczny i program komputerowy do analizy katalizatorów wieloczołowych*. Zeszyty Naukowe OBR Bosmał. 2001
- [8] VOTROBA J., MIKUS O., NGVEN K., HLAVACEK V., SKRIVANEK J.: *Heat and mass transfer in honeycomb catalysts — II*. Chemical Engineering Science 1975
- [9] ŚWIĄTEK A.: *Sprawozdanie z wykonania grantu nr 9T12D00715*. Bielsko — Biała, 2001

Pracę zrealizowano w ramach grantu nr 9T12D00715 finansowanego przez Komitet Badań Naukowych.

Numerical Model for Analysis of Transient State of Multisectional Catalytic Converter

Summary

A two-dimensional model has been developed to simulate the thermal and conversion characteristics of multisectional catalytic converters operating in transient and steady state. The model accounts convective heat and mass transfer, axial and radial heat conduction, chemical reactions and the attendant heat release. The model was used to analyse the transient response of an axisymmetric three-section ceramic monolith system during converter warm up. Paper presents a mathematical and numerical model and some previously calculations for presented multisectional monolith system.