

Stanisław Kruczyński¹, Wojciech Kamela², Kamil Duniec²

BADANIA SYMULACYJNE I EKSPERYMENTALNE UTLENIAJĄCEGO REAKTORA KATALITYCZNEGO SYSTEMU FILTRA CZĄSTEK STAŁYCH W PROGRAMIE AVL BOOST

Streszczenie. W pracy przedstawiono wyniki badań symulacyjnych i eksperymentalnych utleniającego reaktora katalitycznego stosowanego w systemie filtra cząstek stałych silnika o zapłonie samoczynnym GM MultiJet 1,3 w aspekcie oceny zgodności obliczeń symulacyjnych z wynikami eksperymentalnymi. W pracy przedstawiono wyniki badań symulacyjnych wykonanych przy użyciu programu obliczeniowego AVL Boost oraz wyniki badań eksperymentalnych prowadzonych na rzeczywistym silniku spalinowym o zapłonie samoczynnym. W artykule przedstawiono kinetykę reakcji chemicznych wykorzystywanych przez program symulacyjny do obliczeń poziomów konwersji CO, HC oraz udziału NO i NO₂ w NO_x. Jako dane wejściowe do obliczeń symulacyjnych wykorzystano rzeczywiste wartości stężeń związków toksycznych spalin silnika. Analiza przeprowadzona została dla wybranych punktów pracy silnika przy stałej prędkości obrotowej. Przedstawione w pracy wyniki wykazały, że algorytm obliczeniowy programu symulacyjnego pozwala uzyskać zbieżne z wynikami eksperymentalnymi poziomy konwersji CO i HC. Jednocześnie zaobserwowano pewną rozbieżności uzyskanych wyników udziałów NO i NO₂ w NO_x.

Słowa kluczowe: silniki spalinowe, reaktory katalityczne, reaktory utleniające, badania symulacyjne.

WSTĘP

Wraz z rozwojem techniki komputerowej zaczęto stopniowo wprowadzać do użytku coraz to nowe oprogramowanie wspomagające prace inżynierskie i projektowe. Pierwszymi programami były aplikacje przeznaczone głównie do obliczeń inżynierskich w zakresie projektowania i obliczania elementów maszyn i konstrukcji. Z biegiem czasu zaczęto wprowadzać specjalistyczne oprogramowanie do większości dziedzin techniki, w tym aplikacje służące do szeroko pojętego modelowania silników spalinowych. W chwili obecnej na rynku oprogramowania wspomnianego typu mamy dostępnych kilka programów ukierunkowanych głównie na prowadzenie obliczeń modelowych i symulacyjnych zarówno zagadnień związanych z mechaniką i kinetyką elementów silnika spalinowego, procesami fizyko-chemicznymi i termodynamicznymi zachodzącymi w silniku, jak również procesami

¹ Zakładu Silników Spalinowych, Instytut Pojazdów, Wydział Samochodów i Maszyn Roboczych, Politechnika Warszawska, e-mail: skruczyn@simr.pw.edu.pl

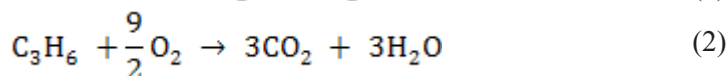
² j.w., e-mail: w.kamela@simr.pw.edu.pl

katalitycznymi zachodzącymi w układach oczyszczania spalin. Narzędzie w postaci oprogramowania symulacyjnego wiążącego ze sobą wiele zjawisk zachodzących w silniku umożliwiło projektantom i konstruktorom weryfikację założeń projektowych już na początkowym etapie tworzenia poszczególnych elementów silnika, w tym układów katalitycznych. Jednym z czołowych producentów oprogramowania wspomagającego prace projektowe nad silnikami spalinowymi jest firma AVL, która wprowadziła na rynek rodzinę programów, do których należą między innymi: AVL Boost, AVL Fire oraz AVL Concerto. Program AVL Boost [1] posiada moduły pozwalające na prowadzenie symulacji osiągnięć silnika, zjawisk akustycznych zachodzących w poszczególnych elementach układu dolotowego i wylotowego silnika oraz zjawisk katalitycznych zachodzących w układach oczyszczania spalin. W celu przeprowadzenia badań symulacyjnych utleniającego reaktora katalitycznego systemu filtra cząstek stałych wykorzystano ostatni z wymienionych modułów programu AVL Boost.

Celem pracy było przeprowadzenie symulacji mającej na celu określenie wpływu objętości i ilości kanalików utleniającego reaktora katalitycznego systemu filtra cząstek stałych na uzyskiwane w nim poziomy konwersji CO i HC oraz stopień udziału NO i NO₂ w NO_x.

MODEL REAKTORA I PARAMETRY SYMULACJI

Model reakcji chemicznych wykorzystywany w programie AVL Boost wykonujący obliczenia symulacyjne utleniającego reaktora katalitycznego silnika wysoko-średniego obejmuje następujące reakcje utleniania tlenu węgla, węglowodoru oraz tlenu azotu:



Program symulacyjny do obliczeń wykorzystuje szybkości reakcji i parametry kinetyczne przedstawione poniżej [2, 3].

Szybkość reakcji pierwszej r'_1 wyrażona jest następująco:

$$r'_1 = \frac{[K_{r1} \cdot e^{\frac{-E_{r1}}{T_s}} \cdot y_{\text{CO}} \cdot y_{\text{O}_2}] \cdot [1 + K_1 \cdot e^{\frac{-E_1}{T_s}} \cdot y_{\text{CO}} + K_2 \cdot e^{\frac{-E_2}{T_s}} \cdot y_{\text{C}_3\text{H}_6}]^{-2}}{T_s \cdot [1 + K_3 \cdot e^{\frac{-E_3}{T_s}} \cdot y_{\text{CO}}^2 \cdot y_{\text{C}_x\text{H}_x}^2] \cdot [1 + K_4 \cdot e^{\frac{-E_4}{T_s}} \cdot y_{\text{NO}}^{0.7}]} \quad (4)$$

Szybkość reakcji drugiej r'_2 wyrażono:

$$r'_2 = \frac{[K_{r2} \cdot e^{\frac{-E_{r2}}{T_s}} \cdot y_{\text{C}_3\text{H}_6} \cdot y_{\text{O}_2}] \cdot [1 + K_1 \cdot e^{\frac{-E_1}{T_s}} \cdot y_{\text{CO}} + K_2 \cdot e^{\frac{-E_2}{T_s}} \cdot y_{\text{C}_3\text{H}_6}]^{-2}}{T_s \cdot [1 + K_3 \cdot e^{\frac{-E_3}{T_s}} \cdot y_{\text{CO}}^2 \cdot y_{\text{C}_x\text{H}_x}^2] \cdot [1 + K_4 \cdot e^{\frac{-E_4}{T_s}} \cdot y_{\text{NO}}^{0.7}]} \quad (5)$$

Szybkość reakcji trzeciej r_3^i wyrażona jest jako:

$$r_3^i = K_{r3} \cdot T_s^A \cdot e^{-\frac{E_{r3}}{T_s}} \cdot \left(c_{NO}^2 \cdot c_{O_2} - \frac{c_{NO_2}^2}{K_{eq,1}} \right) \quad (6)$$

W przedstawionych powyżej równaniach wykorzystano następujące oznaczenia:

$K_{r1}, K_{r2}, K_{r3}, K_1, K_2, K_3, K_4$ – współczynniki przedwykładnicze równania Arrheniusa,

$E_{r1}, E_{r2}, E_{r3}, E_1, E_2, E_3, E_4$ – temperatury aktywacji,

$Y_{CO}, Y_{O_2}, Y_{C_3H_8}, Y_{NO}$ – molowe udziały substancji w reaktywnej powierzchni fazy gazowej,

$c_{NO}, c_{O_2}, c_{NO_2}$ – stężenia substancji na powierzchni aktywnej,

T_s – temperatura monolitu,

A – wartość określająca zależność temperaturową,

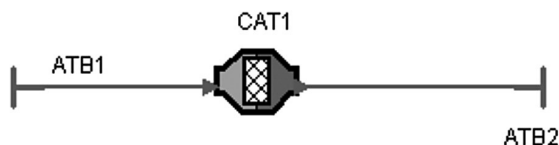
Stała równowagi $K_{eq,1}$, we wzorze na prędkość trzeciej reakcji będąca funkcją temperatury nośnika reaktora katalitycznego zdefiniowana jest jako:

$$K_{eq,1} = \left(\frac{p_{atm}}{RT_s} \right)^{-1} \cdot e^{\left(-18.518 + \frac{13607}{T_s} + 0.5582 \cdot \frac{T_s}{1000} - 0.04489 \cdot \left(\frac{T_s}{1000} \right)^2 - 0.8278 \cdot \log\left(\frac{T_s}{1000} \right) \right) \quad (7)$$

Gdzie: p_{atm} – wartość ciśnienia atmosferycznego, R – uniwersalna stała gazowa.

Wartości wszystkich współczynników program AVL Boost przyjmuje jako domyślne i nie zostały one na potrzeby symulacji zmienione.

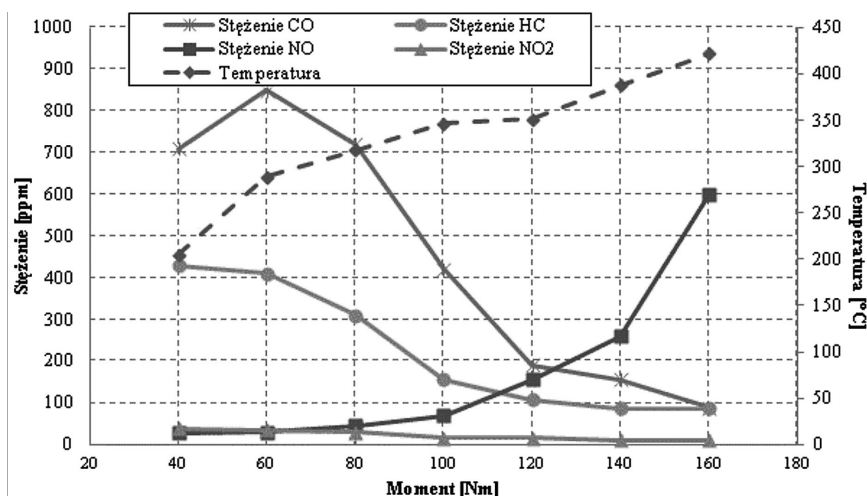
Zastosowany w programie model utleniającego reaktora katalitycznego do silnika spalinowego przedstawiony jest jako pojedynczy reaktor (CAT1) z możliwością zdefiniowania warunków brzegowych na jego wejściu (ATB1) i wyjściu (ATB2). Widok takiego układu wykorzystywany w programie przedstawiono na rysunku 2.



Rys. 1. Symulowany utleniający reaktor katalityczny (CAT1) wraz z warunkami brzegowymi (ATB1, ATB2)

Wykorzystanie modułu Aftertreatment oprogramowania AVL Boost pozwoliło na pominięcie procesu tworzenia od podstaw modelu silnika spalinowego generującego spaliny o określonym składzie. W użytym module warunki brzegowe na wejściu reaktora katalitycznego określające stężenia poszczególnych składników

spalin, temperaturę konwersji katalitycznej oraz ciśnienie na wlocie układu zostały wprowadzone na podstawie danych uzyskanych w trakcie badań prowadzonych na doładowanym silniku Fiat MultiJet o pojemności skokowej wynoszącej 1,3 dm³. W trakcie badań silnik pracował na charakterystyce obciążeniowej ze stałą prędkością obrotową wynoszącą 2000 obr/min. Na rysunku 2 przedstawiono wartości stężeń analizowanych związków toksycznych przed reaktorem katalitycznym oraz temperaturę reaktora w funkcji momentu generowanego przez silnik.



Rys. 2. Zmierzone wartości stężeń związków toksycznych i temperatura reaktora wykorzystane jako wejściowe warunki brzegowe do symulacji

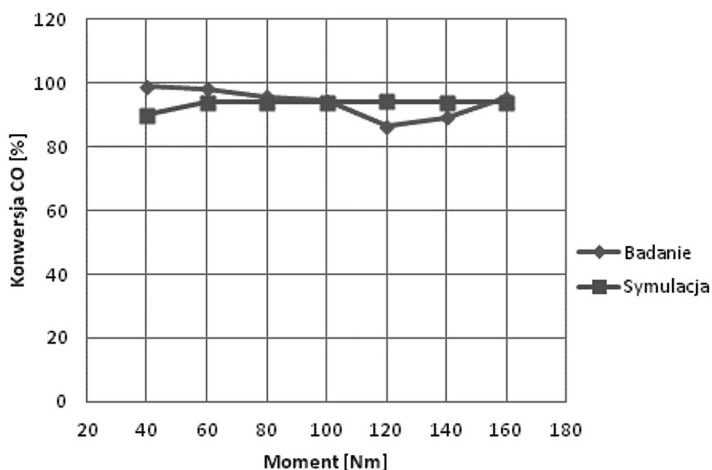
Jako warunek brzegowy na wyjściu reaktora program wykorzystuje wyłącznie wartości ciśnienia za reaktorem katalitycznym, które zostały również wyznaczone w trakcie eksperymentu stanowiskowego.

Wstępne próby prowadzone z wykorzystaniem programu AVL Boost pokazały, że wyniki symulacji ustalają się już po około 15 sekundach. Jako całkowity czas symulacji wybrano okres wynoszący 100 sekund oraz częstotliwość próbkowania równą 0,5 sekundy. W celu uzyskania dokładniejszych wyników symulacji przy określaniu stężeń gazów na wlocie reaktora oprócz wartości zamieszczonych na rysunku 2 skład gazu rozszerzono dodatkowo o zmierzone w trakcie tego samego eksperymentu wartości stężeń CO₂, O₂ oraz N₂.

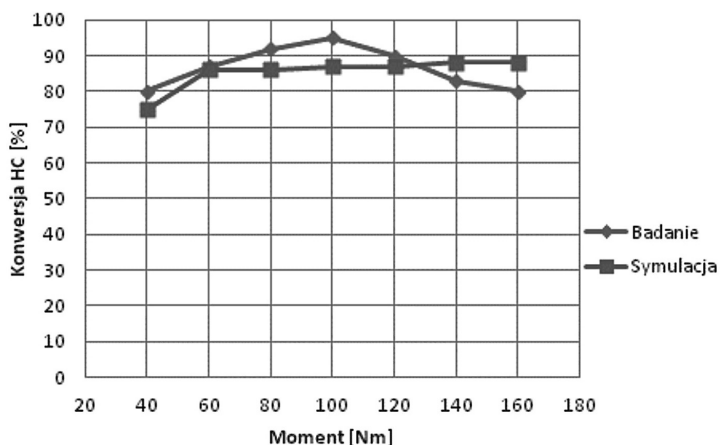
WYNIKI OBLICZEŃ SYMULACYJNYCH

Prowadzone obliczenia symulacyjne miały na celu porównanie wyników obliczeń symulacyjnych konwersji CO, THC oraz przemian tlenków azotu w tym konwersji NO i NO₂ oraz ocenę udziału NO w NO_x i NO₂ w NO_x dla standardowego

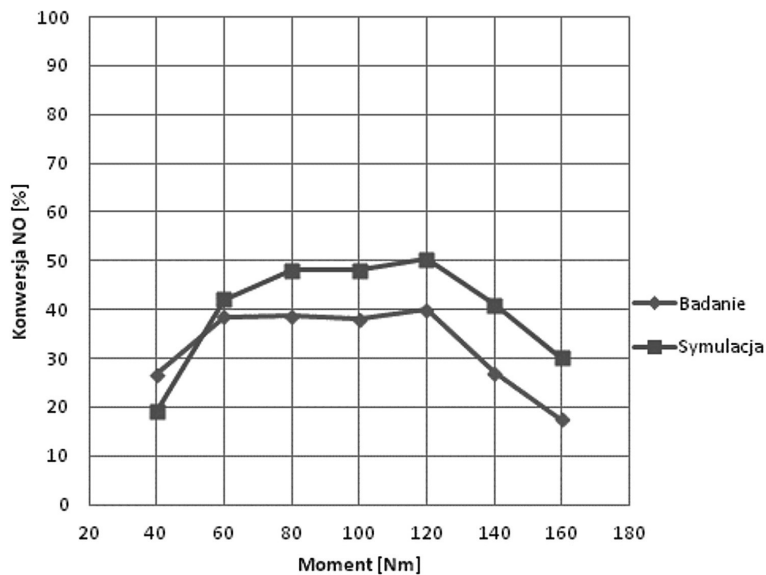
reaktora katalitycznego stosowanego w badanym silniku z wynikami pomiarów. Utleniający reaktor katalityczny wykorzystujący monolit kordierytowy posiadał pojemność $V = 1,4 \text{ dm}^3$ przy gęstości kanalików 400 cpsi i ładunku metali szlachetnych 2.5 g Pt na 1 dm^3 objętości reaktora. Na rysunkach 3-6 przedstawiono porównanie wyników obliczeń symulacyjnych z wynikami badań eksperymentalnych kolejno dla konwersji CO, THC, NO i NO_2 oraz na rysunkach 7 i 8 udziałów NO w NO_x i NO_2 w NO_x na charakterystyce obciążeniowej silnika przy stałej prędkości obrotowej $n = 2000 \text{ obr/min}$



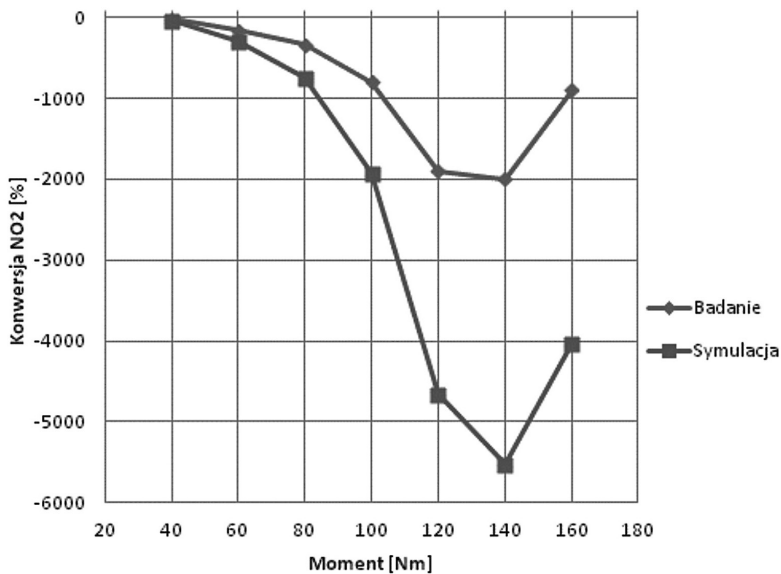
Rys. 3. Obliczenia symulacyjne i pomiary eksperymentalne konwersji CO w utleniającym reaktorze katalitycznym



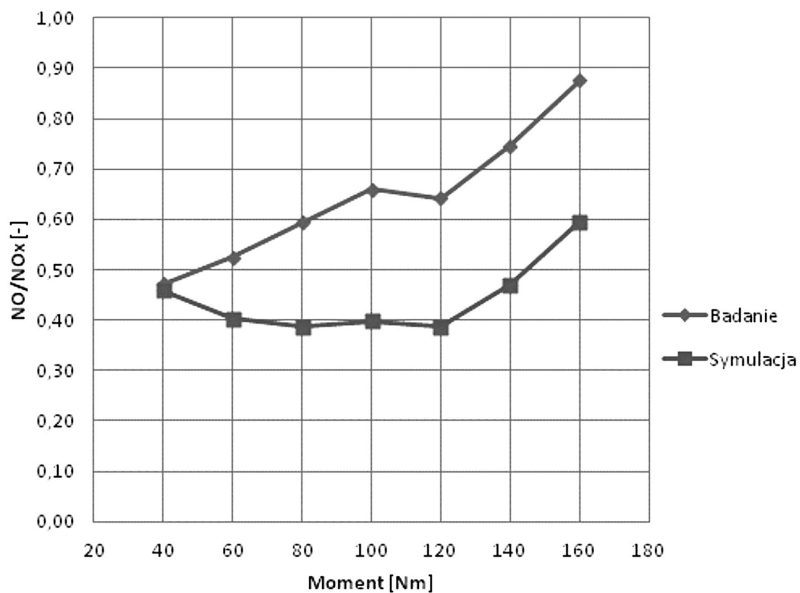
Rys. 4. Obliczenia symulacyjne i pomiary eksperymentalne konwersji HC w utleniającym reaktorze katalitycznym



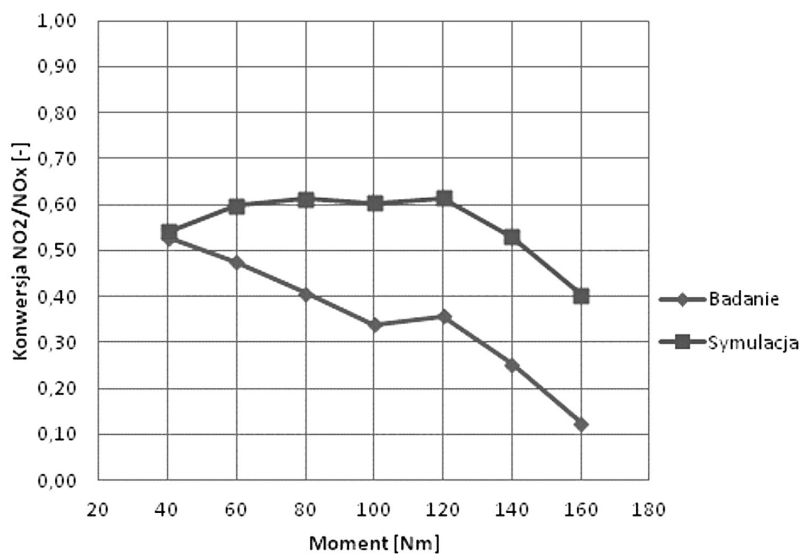
Rys. 5. Obliczenia symulacyjne i pomiary eksperymentalne konwersji NO w utleniającym reaktorze katalitycznym



Rys. 6. Obliczenia symulacyjne i pomiary eksperymentalne konwersji NO₂ w utleniającym reaktorze katalitycznym



Rys. 7. Obliczenia symulacyjne i pomiary eksperymentalne udziału NO w NO_x w utleniającym reaktorze katalitycznym



Rys. 8. Obliczenia symulacyjne i pomiary eksperymentalne udziału NO_2 w NO_x w utleniającym reaktorze katalitycznym

WNIOSKI

Na podstawie wyników obliczeń symulacyjnych uzyskanych w programie AVL Boost można było postawić następujące wnioski:

- wykorzystany moduł Aftertreatment programu AVL Boost pozwala w prosty sposób, bez konieczności projektowania całego silnika spalinowego symulować wyłącznie procesy zachodzące w układach oczyszczania spalin,
- uzyskane przebiegi zmian konwersji CO, HC są w przybliżeniu analogiczne z przebiegami uzyskiwanymi na rzeczywistym reaktorze utleniającym stosowanym w silnikach o zapłonie samoczynnym,
- uzyskane w badaniach symulacyjnych przebiegi zmian udziałów NO i NO₂ w NO_x odbiegają w niewielkim stopniu od zmian zarejestrowanych w badaniach eksperymentalnych, zachowując jednak ich charakter.

LITERATURA

1. AVL Boost Manuals. Graz Austria, 2010
2. Koltsakis G. C., Konstantinidis, P.A. and Stamatelos A. M.. *Development and application range of mathematical models for 3-way catalysts*. Applied Catalysis B.Environmental 12, p:161-191, 1997,
3. Konstandopoulos A. G., Johnson J. H.: *Wall-flow diesel particulate filter – Their pressure drop and collection efficiency*. SAE International Paper 890405, 2001

AVL BOOST SIMULATION AND EXPERIMENTAL INVESTIGATIONS OF OXIDIZING CATALYTIC REACTOR FROM DIESEL PARTICLE FILTER SYSTEM

Abstract

Article contains results of simulations and experimental investigations of oxidizing catalytic reactor from diesel particle filter system used in 1,3 MultiJet GM Diesel engine. Investigations were done to compare conformity of simulations and experimental results. Simulations were done under program for simulation calculations AVL Boost and experimental result were taken from investigations carried on Diesel engine. Chemical reactions and reactions kinetics on which calculations of CO, HC conversion levels and NO and NO₂ participation in NO_x were based on are specified in this paper. As the input data for simulation calculations the actual values of toxic species concentrations in exhaust gases at the outlet of diesel engine were used. Measurements of toxic species were made in chosen engine steady state work points. Results presented in this paper have shown that calculations algorithm in AVL Boost program allows to achieve CO and HC conversion levels that are convergent with experimental results. Simultaneously some differences were observed in results of NO and NO₂ participation in NO_x.

Keywords: combustion engines, catalytic reactors, simulation, air pollution, environmental protection.