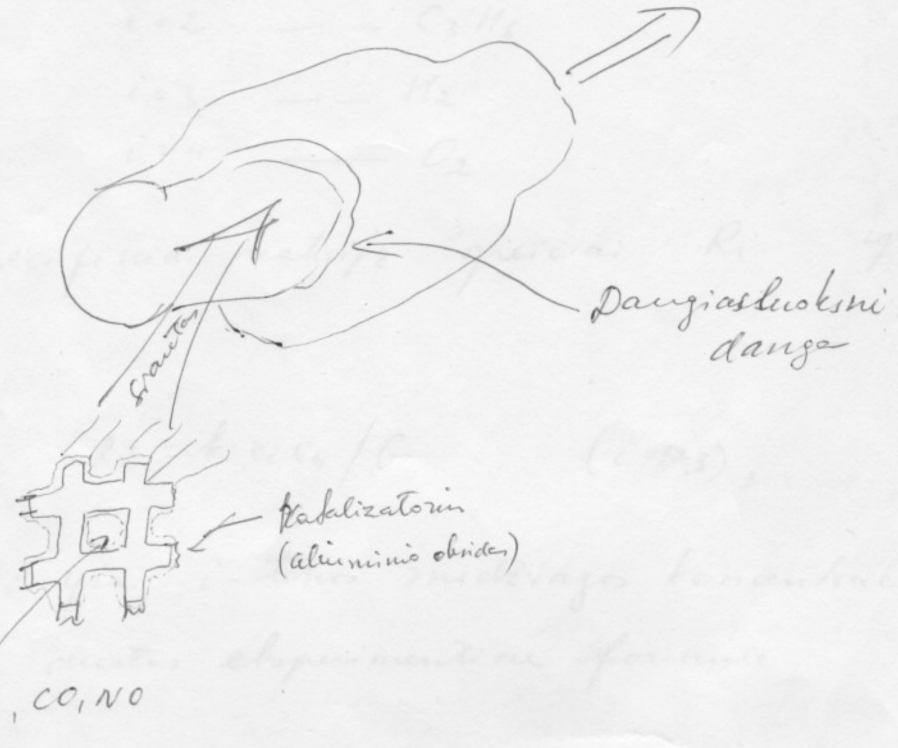
- 1 -

6. Apie katalizinio konverterio darbą

1. Įvadas

Katalizinis konverteris yra įtaisas, ~~talpi-namas~~ įrengiamas automobilyje ~~tarp~~ ~~po variatoriaus~~ tarp variklio ~~išmetimo~~ ir išmetamojo vamzdžio. Degimo produktai išvestiesi ~~išmetamosios~~ dujos ~~ištekėję iš variklio~~, praeina ~~pro~~ ~~katalitinį~~ konverterį, kuriame yra chemiškai apdorojamos, ir patenka į aplinką jau ne taip kenksmingų junginių pavidalu.



Kadangi reikalavimai išmetamųjų dujų koncent-racijai griežtėja, tai yra svarbu gerinti katalizinių konverterių savybes. ~~Tikslas~~ Pirmaeilis tikslas – prognozuoti galutinį emisijos lygį, esant ~~kai~~ duotam variklio dujų išmetimo lygiui ~~trumpiausi~~ ~~atvejai~~ kenksmingų junginių daugiausiai yra išmetama ~~Kuriai~~ ~~per~~ netu esant variklio šildymosi, ~~esant~~ dideliam apkrovimui, esant blogam variklio darbui. Šiuolaikiniai konverteriai ~~yra~~ paprastai yra monolitiniai keraminiai. Dujos pratekėdamos konverterio vamz-deliais, reaguoja su deguonimi arti vamzdelių paviršiaus ir virsta neutraliais junginiais

2. Modeli. Čia nagrinėjamas konvertorius, kuriame vyksta ~~yra~~ CO, angliavandenilių ir H_2 oksidacijos reakcijos. Azoto okside reakcija čia nenagrinėjama. ~~///~~ Reikalingos cheminės formulės atrodo taip:

(1) $CO + \frac{1}{2} O_2 \to CO_2$

(propilenas) $C_3H_6 + \frac{9}{2} O_2 \to 3CO_2 + 3H_2O$

$H_2 + \frac{1}{2} O_2 \to H_2O$

Tegul $i=1$ atitinka CO

$i=2$ —"— C_3H_6

$i=3$ —"— H_2

$i=4$ —"— O_2

Specifiniai reakcijų greičiai R_i yra pavidalo

(2) $R_i = k_i c_i c_4 / G \qquad (i=1,2,3)$,

kur c_i yra i-tosios medžiagos koncentracija, o G yra duotos eksperimentinė formulė

(3) $G = T(1 + K_1 c_1 + K_2 c_2)^2 \cdot (1 + K_3 c_1^2 c_2^2)(1 + K_4 c_{NO}^{0.7})$,

kur C_{NO} yra NO koncentracija, k_i, K_j priklauso tik nuo temperatūros T, k_1, k_2, K_4 yra monotoniškai didėjantys pagal T, o K_1, K_2, K_3 - monotoniškai mažėjantys pagal T. Paprastai konvertoryje yra išlaikoma deguonies ir degiųjų medžiagų pusiausvyra, todėl galima tvirtinti, kad galioja tiems dėsnis (žr. (1))

(4) $R_4 = 0.5R_1 + 4.5R_2 + 0.5R_3$

Tegul T_g – dujų ~~t~~temperatūra

T_S – konverterio vidinių paviršių temperatūra

c_{gi} – i-tosios medžiagos koncentracija bendrame dujų sraute

c_{si} – i-tosios medžiagos paviršinė koncentracija.

Jeigu ignoruosime skirtumus tarp atskirų kanalų, tai, pažymėję x ilgio parametrą išilgai kanalų, gausime tokią diferencialinių lygčių sistemą:

$$(5) \quad C(T_S)\frac{\partial T_S}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T_S}{\partial x^2} + h(T_g)(T_g - T_S) + \alpha \sum_{j=1}^{3} R_j(T_S, \vec{c}_S)$$

$$(6) \quad w \frac{\partial T_g}{\partial x} = h(T_g)(T_S - T_g)$$

$$(7) \quad -w \frac{\partial c_{gi}}{\partial x} = K_{mi}(T_g)(c_{gi} - c_{si}) \quad , (i = 1..4),$$

prie visų x ir t, $0 < x < \infty$, $t > 0$, kur $x = 0$ yra pradinis konverterio taškas; laikysime, kad konverteris yra labai ilgas, t.y. jis užima visą intervalą $0 < x < \infty$.

Cheminės reakcijos tarp dujų prie konverterio vidinių paviršių ir dujų bendrame sraute yra aprašomos algebrinėmis lygtimis

$$(8) \quad K_{mi}(T_g)(c_{gi} - c_{si}) = a R_i(T_S, \vec{c}_S) \quad , (i = 1, \dots 4)$$

Čia a yra katalizatoriaus aktyvumo faktorius, R_j – specifiniai reakcijų greičiai (2)-(4), h – šilumos laidumo koeficientas, $C(T_S)$ – kieto kūno specifinė šiluma, K_{mi} – i-tosios medžiagos masės pernešimo koeficientas, w – masės srauto greitis. ~~Kadangi~~ galioja $w = w(t)$.

Funkcija $w(t)$ yra žinoma. Taip pat reikia nurodyti kraštines sąlygas funkcijoms

(9) T_s, T_g ir $\vec{c}_g$, kai $x=0, t>0$

ir pradines sąlygas

$$T_s\big|_{t=0} = T_s^0 \,, \cancel{\text{kai}}\ \forall x$$

Paprastai T_s^0 yra konstanta

Sistema (5)-(10) yra panaši į anksčiau nagrinėtą difuzijos-reakcijos sistemą. Tačiau šiuo atveju dujų greitis toks didelis, kad dujų temperatūros difuziją galima ignoruoti.

3. Valdymo problema.

Katalitiniai konverteriai yra konstruojami turint tikslą minimizuoti teršalų koncentraciją tam tikroje konverterio vietoje, sakykime $x = L$. Panagrinėsime šią problemą svarbiausiu variklio įšilimo atveju. Variklį dažniausiai įjungiame, esant žemai jo temperatūrai, tarkime $T_s = 300°K$. Esant žemai temperatūrai, reakcijos vyksta ~~labai~~ lėtai, todėl konverteris nepadirba efektyviai kenksmingų dujų į nekenksmingas. Tam, kad paspartinti konversiją, turėtume pakelti temperatūrą ~~ga~~ taške $x=0$, sakykime tokiu būdu:

$$T_s\big|_{x=0} = 300 + S(t) \,,\quad S(t) \geq 0$$

Funkcija $S(t)$ yra vadinama valdymo funkcija.

Dėl nuodaciunių priežasčių būtina pareikalauti papildomų apribojimų funkcijai $S(t)$, pavyzdžiui,

$$(11) \qquad \int_0^{t_0} S(t)\,dt \le M \ , \quad S(t) \le N \ , \text{ kai } 0 \le t \le t_0 ,$$

kur t_0 yra šildymo laiko intervalas, M, N – duotos teigiamos konstantos.

Mūsų tikslas – sumažinti koncentraciją c_{gi} taške $x = L$. Tokiu būdu, mes norime sumažinti dydį

$$(12) \qquad \sum_{j=1}^{3} \lambda_j \int_0^{t_0} c_{gj}(L,t)\,dt ,$$

kur λ_j yra tam tikros parinktos teigiamos konstantos.

Kiekvienam parinktam valdymui $S(t)$ mes turime išspręsti sistemą (5)–(10), o po to apskaičiuoti (12) išraišką. Šią išraišką pažymime $J(S)$

$$(13) \qquad J(S) = \sum_{j=1}^{3} \lambda_j \int_0^{t_0} c_{gj}(L,t)\,dt$$

ir vadiname jį tikslo funkcionalu (kai nors funkcija)

Įveriame valdymo funkcijų aibę

$$(14) \qquad A = \left\{ S(t) \ , \ 0 \le t \le t_0 , \ S(t) \text{ – dalimis tolydi} , \ 0 \le S(t) \le N , \ \int_0^{t_0} S(t)\,dt \le M \right\}$$

Tada mūsų uždavinys bus išspręsti tokį optimalaus valdymo problemą:

$$(15) \qquad \underset{S \in A}{\text{minimizuoti}} \ J(S)$$

4. Supaprastintas modelis

Optimalaus valdymo problemos modeliui (5)-(10) reikalauja labai didelių skaičiavimų. Galima modelį supaprastinti, išnaudojant pagrindines jo savybes.

Leisime, kad $h(T_g)=0$, ir kad yra tik viena medžiaga su koncentracija c; $c=c_s$ ~~ta~~ vamzdelių paviršiuje ir $c=c_g$ dujų sraute. Tarsime, kad reakcijos greitis yra

$$R = R(T_s, c_s) = (T_s-300)c_s$$

Taigi, esant žemai variklio temperatūrai reakcijos greitis lygus 0, o ~~kai~~ temperatūrai didėjant reakcijos greitis didėja. Taip pat ~~das~~ padarę prielaidas

$\lambda=1$, $a=1$, ~~ℓ~~ $C(T_s)=1$, $K_{mi}\equiv 1$, $w=1$

ir pažymėję $T=T_s-300$, $u=c_g$

sistemą (5)-(8) suvesime į

$$(16)\quad \frac{\partial T}{\partial t}=\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+Tc_s$$

$$(17)\quad -\frac{\partial u}{\partial x}=u-c_s$$

$$(18)\quad u-c_s=Tc_s$$

Iš paskutiniosios lygties gauname

$$c_s=\frac{u}{1+T}$$

ir, įstatę į (16), (17), gausime

(19) $\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{T}{1+T} u \qquad 0 < x < \infty, \quad 0 < t < t_1$

(20) $-\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{T}{1+T} u \qquad 0 < x < \infty, \quad 0 < t < t_1$

Taip pat turime pradines sąlygas

(21) $T(x,0) = 0$

ir kraštines sąlygas

(22) $u(0,t) = u_0$ u_0 – teigiama konstanta

(23) $T(0,t) = S(t)$,

kur u_0 yra dujų koncentracija jams patenkant į konverterį. Taip pat pareikalausime, kad

(24) $T(x,t) \underset{x \to \infty}{\to} 0$ tolygiai pagal t $0 \le t \le t_0$.

Formuluojame optimalaus valdymo problemą sistemai (19) – (24), kur

(25) $J(s) = \int_0^{t_0} u(L,t)\,dt$

(19) – (23) ~~problemos~~ uždavinio skaitiniam sprendinimui galime naudoti išreikštines arba neišreikštines schemas

1) Neišreikštinė schema

$$\frac{T_m^{n+1}-T_m^n}{\Delta t}=\frac{T_{m-1}^{n+1}-2T_m^{n+1}+T_{m+1}^{n+1}}{\Delta x^2}+\frac{T_m^n}{1+T_m^n}u_m^n$$

$$\frac{u_{m+1}^n-u_m^n}{\Delta x}=-\frac{T_m^n}{1+T_m^n}u_m^n$$

2) Išreikštinė schema

$$\frac{T_m^{n+1}-T_m^n}{\Delta t}=\frac{T_{m-1}^n-2T_m^n+T_{m+1}^n}{(\Delta x)^2}+\frac{T_m^n}{1+T_m^n}u_m^n$$

$$\frac{u_{m+1}^n-u_m^n}{\Delta x}=-\frac{1+T_m^n}{1+T_m^n}u_m^n$$

Uždavinys: Tegul $L=10$, $t_0=4$ ir tegul tokiu ~~du~~ $S(t)$ variantu

a) $S(t)=1, \quad 0<t\le 4$

b) $$S(t)=\begin{cases}\frac{1}{2} & 0\le t\le 2\\ \frac{3}{2} & 2<t\le 4\end{cases}$$

~~Kai~~ Kuriam atvejui gaunt $J(S)$ ribinį mažesnį?