

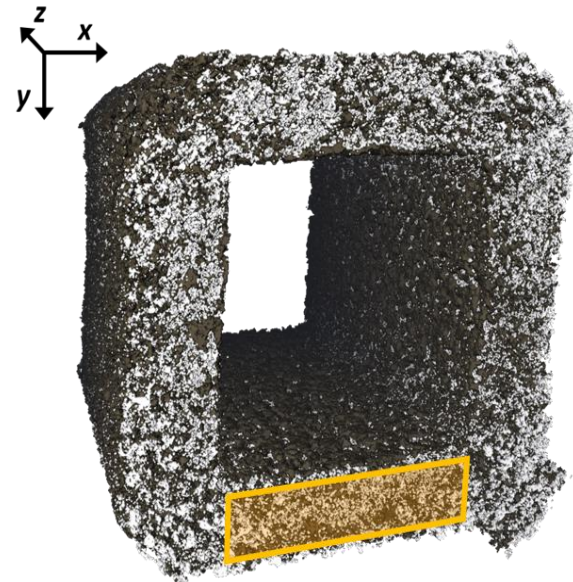
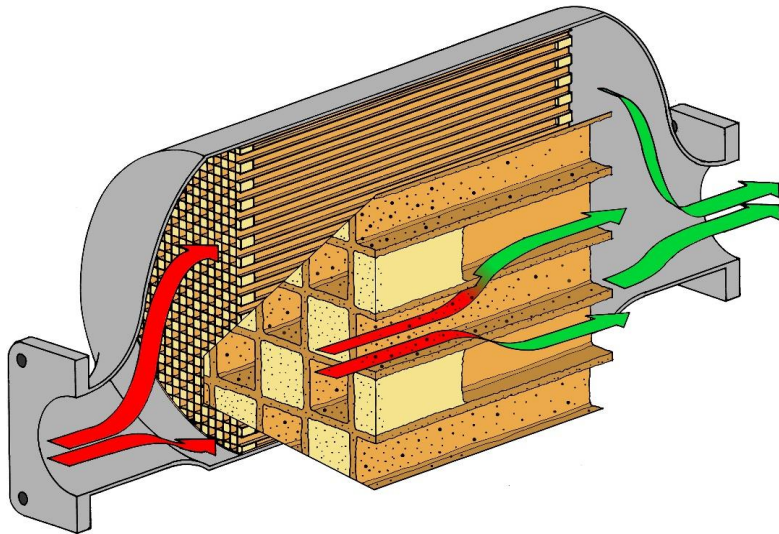


Modelování toku a reakce v porézních materiálech

Ing. Marie Plachá

Motivace

1. Redukce zplodin ve výfukových plynech
 - Hlavní zplodiny: CO, NO_x, uhlovodíky a prachové částice
2. Nové legislativní omezení
 - Katalyzátor i filtr pevných částic
3. Predikce toku plynu v katalytických filtrech pevných částic
 - Zlepšení výrobního procesu



Modelování filtru

1. Micro-scale - OpenFOAM

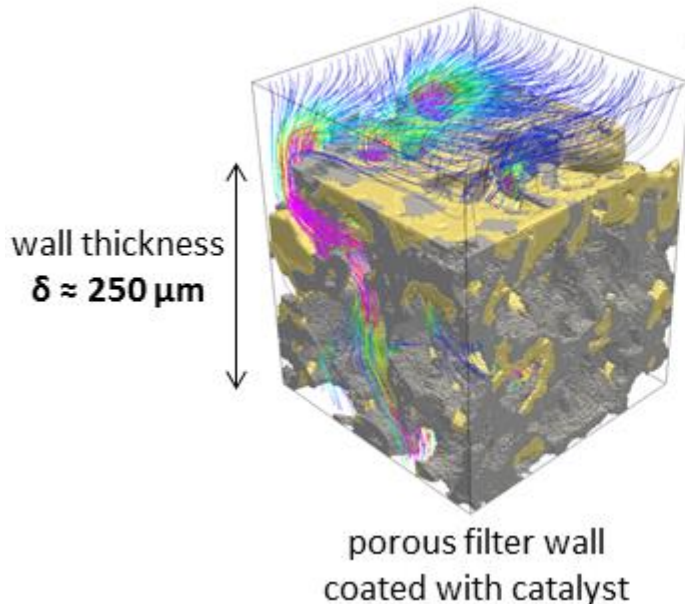
- Tlaková ztráta skrz stěnu filtru → permeabilita
- Reakce v katalytickém coatingu

2. Macro-scale

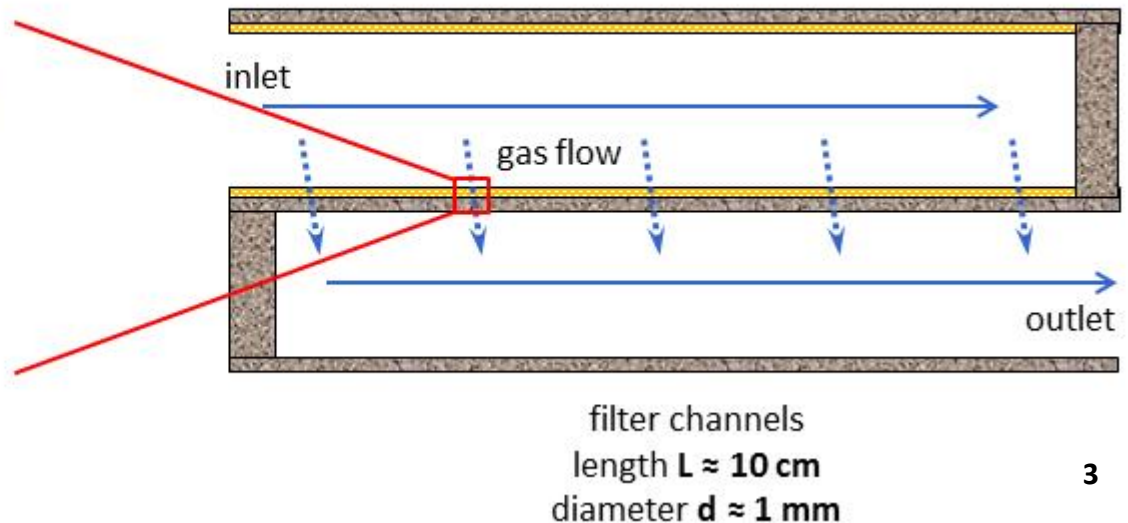
- Tlaková ztráta na vstupu a výstupu
- Tlaková ztráta v kanálku

Celková tlaková ztráta

micro-scale



macro-scale



Popis micro-scale modelu

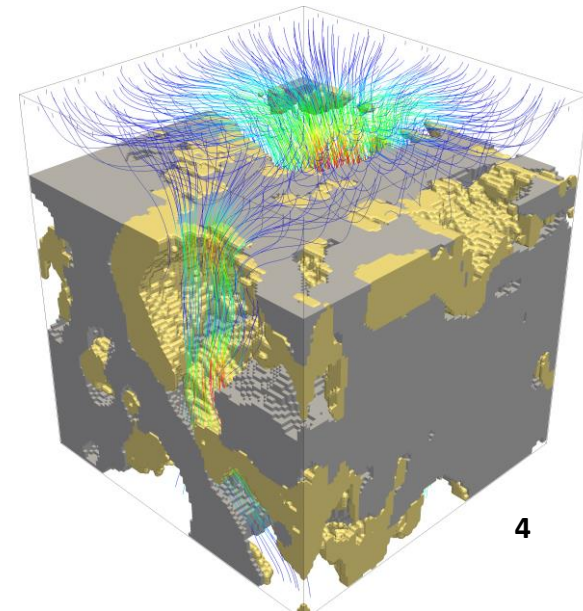
1. Model toku

$$\nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{u}) = -\nabla P + \mathbf{s}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

$$\mathbf{s} = \begin{cases} 0 & \text{in } \Omega_p \\ -\frac{\nu}{\kappa} \mathbf{u} & \text{in } \Omega_c, \end{cases}$$

→ *porousSimpleFoam*



Popis micro-scale modelu

1. Model toku

$$\nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{u}) = -\nabla P + \mathbf{s}$$

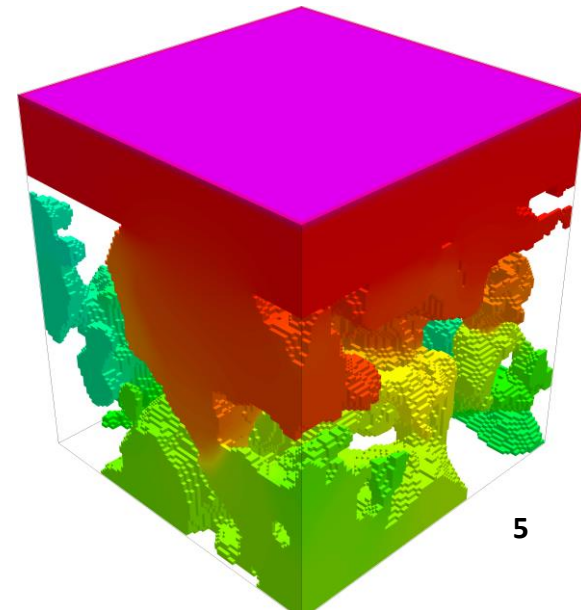
$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

→ *porousSimpleFoam*

2. Model difuze a reakce

$$\nabla \cdot (\mathbf{u} y_i) - D_i^{\text{eff}} \nabla \cdot (\nabla y_i) = \frac{r_i}{c_T}, i = 1, \dots, n$$

$$D_i^{\text{eff}} = \begin{cases} D_i^{\text{vol}} & \text{in } \Omega_p \\ \frac{\varepsilon_c D_i^{\text{vol}}}{\tau_c} & \text{in } \Omega_c \end{cases}, \quad i = 1, \dots, n$$



Popis micro-scale modelu

1. Model toku

$$\nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{u}) = -\nabla P + \mathbf{s}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

→ *porousSimpleFoam*

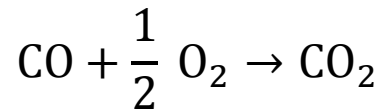
2. Model difuze a reakce

$$\nabla \cdot (\mathbf{u} y_i) - D_i^{\text{eff}} \nabla \cdot (\nabla y_i) = \frac{r_i}{c_T}, i = 1, \dots, n$$

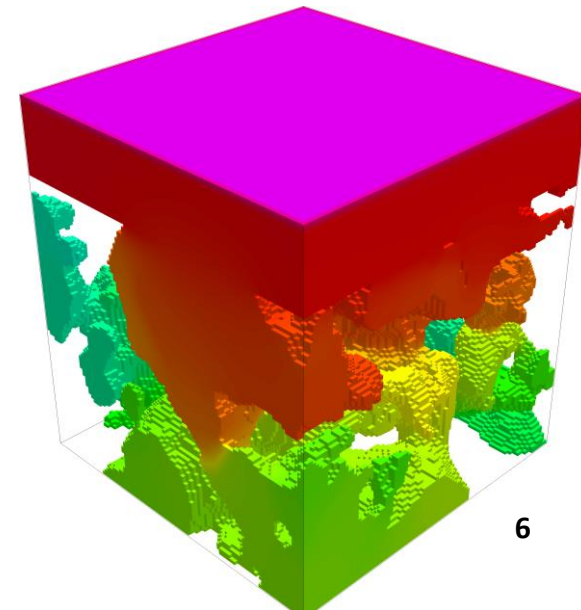
$$D_i^{\text{eff}} = \begin{cases} D_i^{\text{vol}} & \text{in } \Omega_p \\ \frac{\varepsilon_c D_i^{\text{vol}}}{\tau_c} & \text{in } \Omega_c \end{cases}, \quad i = 1, \dots, n$$

→ *vyvinutý solver*

- Použitá modelová rovnice

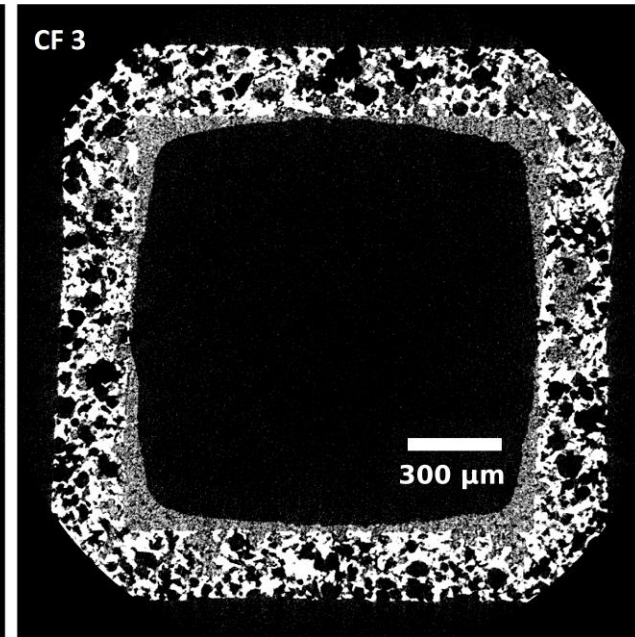
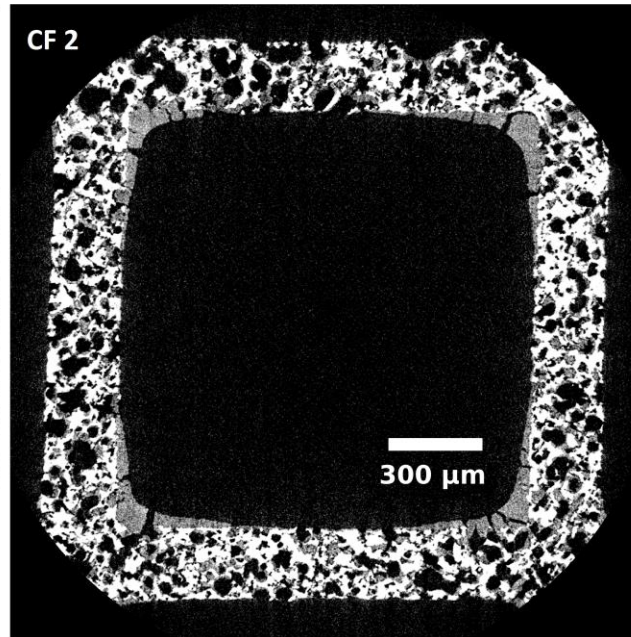
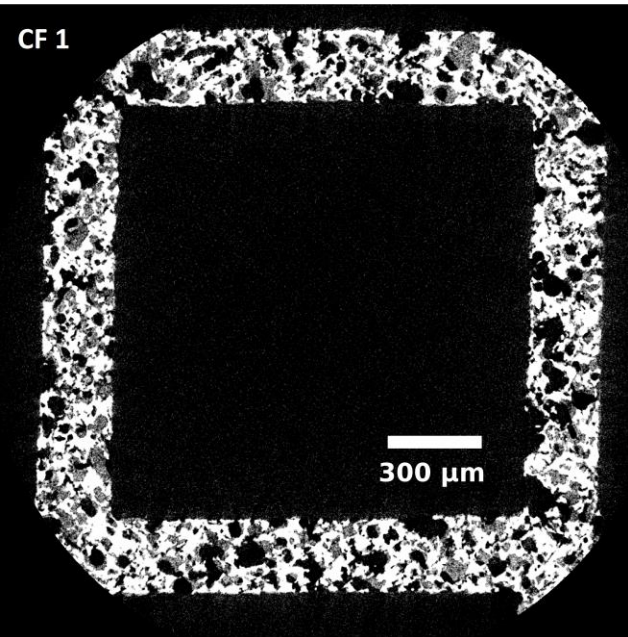


$$r_i = \tilde{v}_i k \frac{y_{\text{CO}} y_{\text{O}_2}}{(1 + K_{\text{inh}} y_{\text{CO}})^2}, \quad i = \text{CO}, \text{O}_2, \text{CO}_2$$



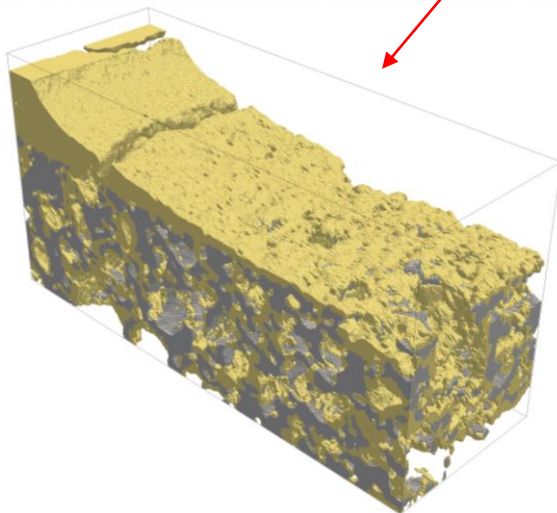
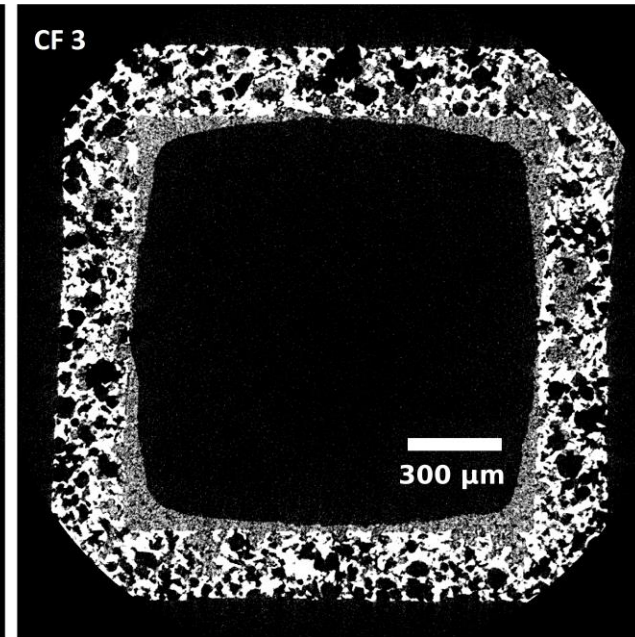
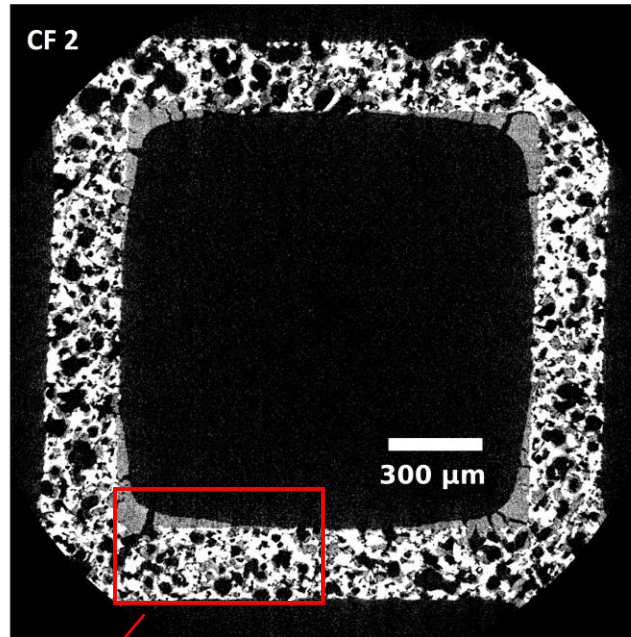
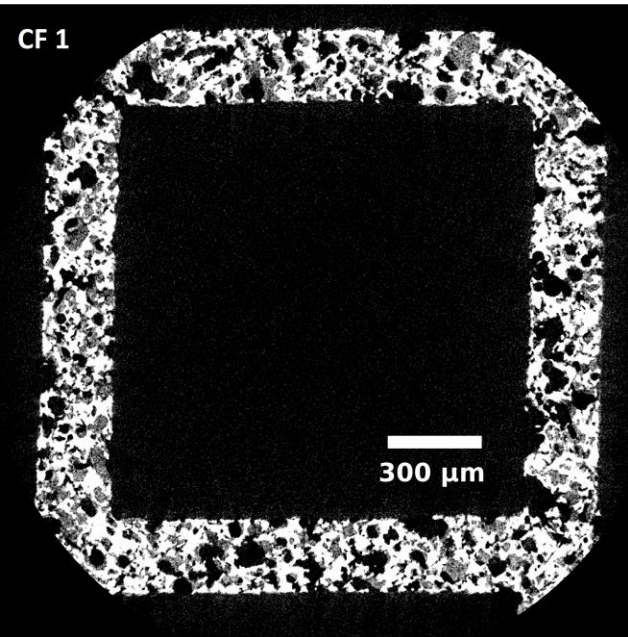
Rekonstrukce porézní stěny filtru

2D skeny z mikrotomografie



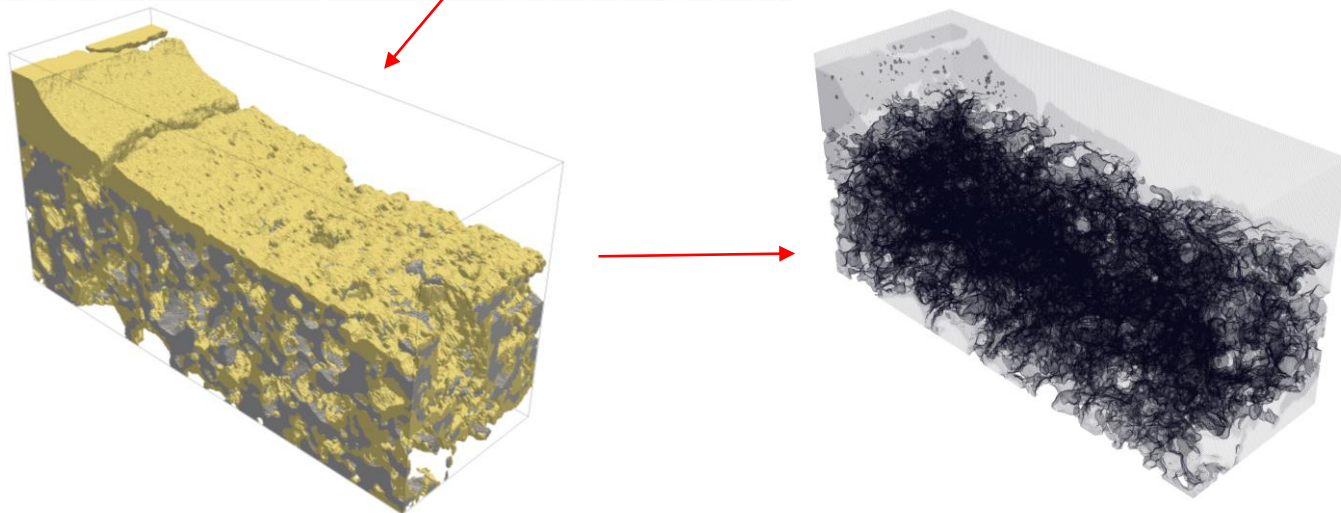
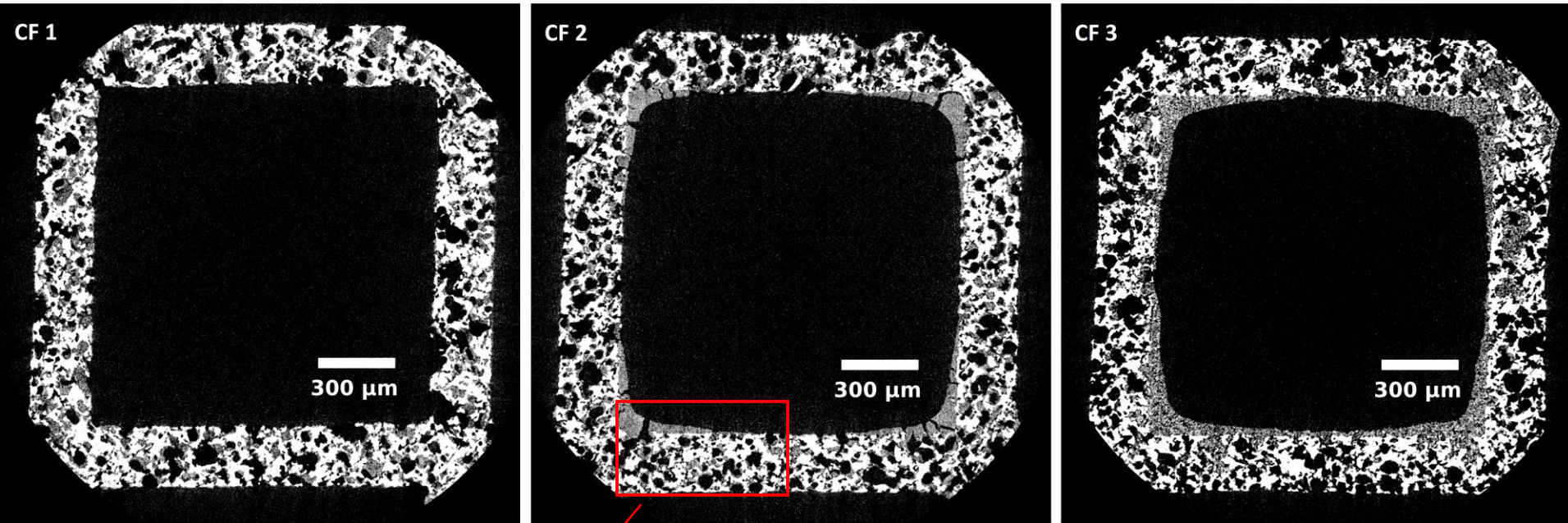
Rekonstrukce porézní stěny filtru

2D skeny z mikrotomografie



Rekonstrukce porézní stěny filtru

2D skeny z mikrotomografie

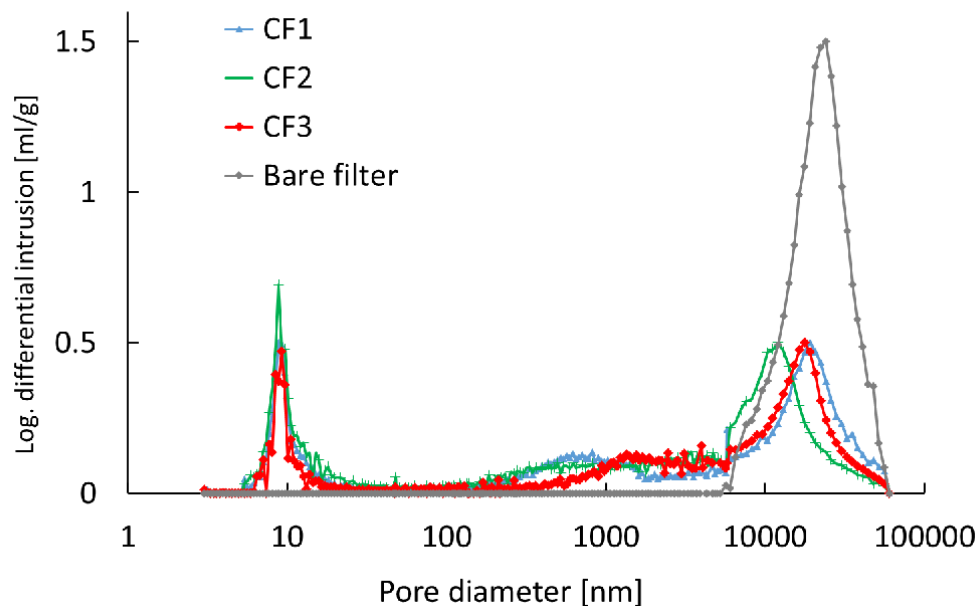


Parametry rekonstruovaných stěn filtru

Název vzorku	L (μm)	ε_{Hg} (%)	ε_{CT} (%)
CF1	200	53.8	36.0
CF2	298	55.4	40.8
CF3	298	60.5	41.5

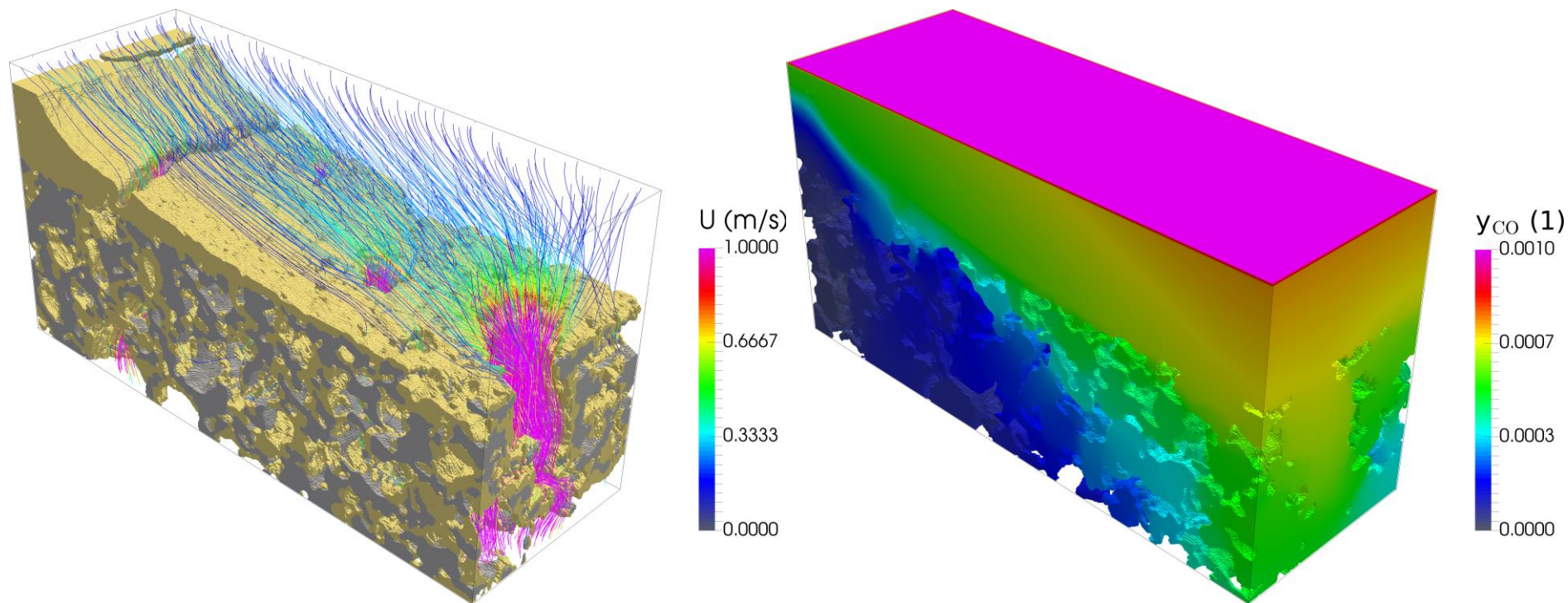
L = tloušťka vrstvy, ε_{Hg} = porozita ze rtuťové porozimetrie a ε_{CT} = porozita z rentgenové mikrotomografie.

Distribuce velikosti pórů ze rtuťové porozimetrie



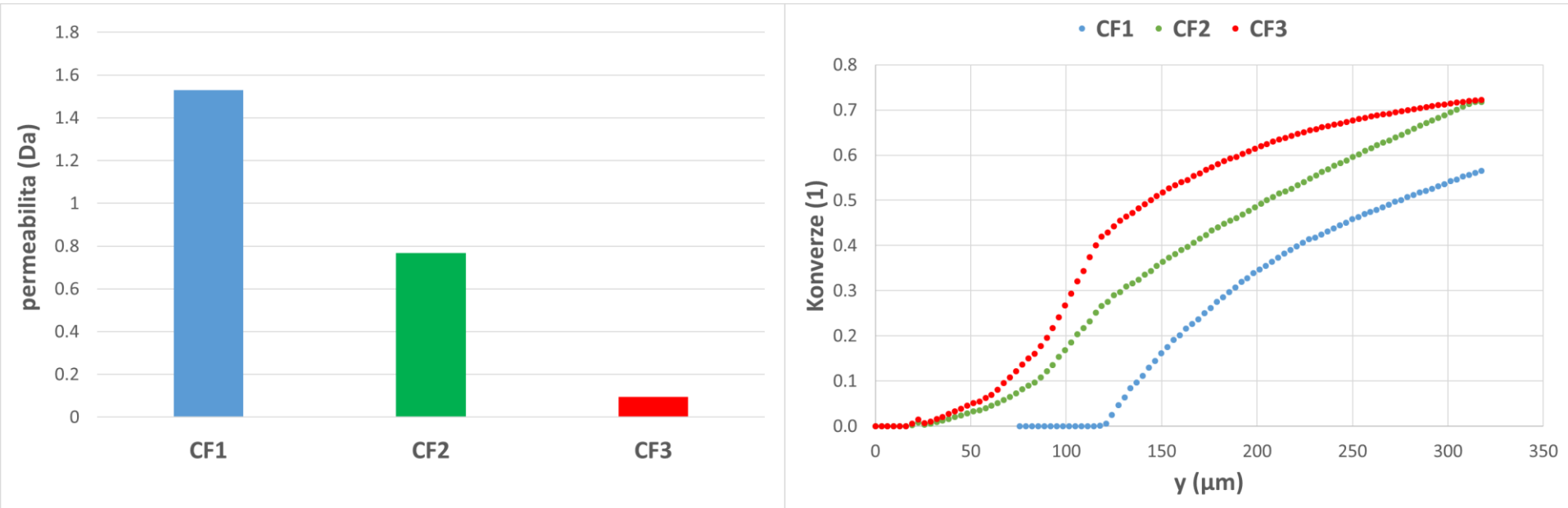
Rychlostní a koncentrační profil

Vzorek CF 2

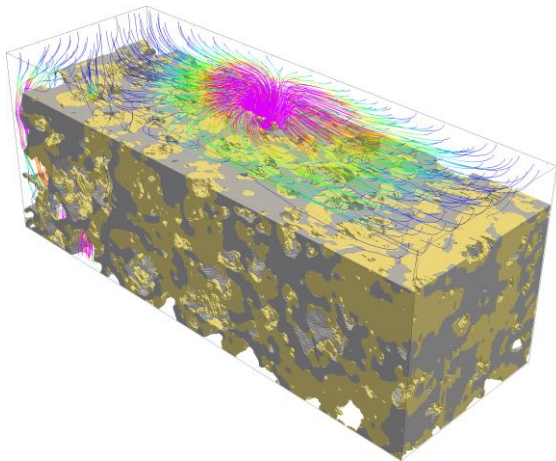


Nastavení simulace: $U_{in} = 0.1$ m/s, $y_{COin} = 0.001$, $t = 180^\circ\text{C}$

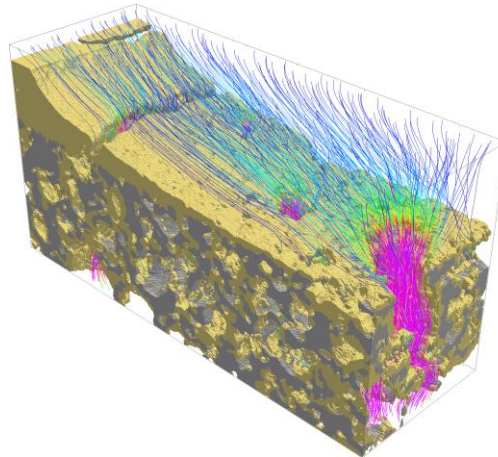
Permeabilita and konverze



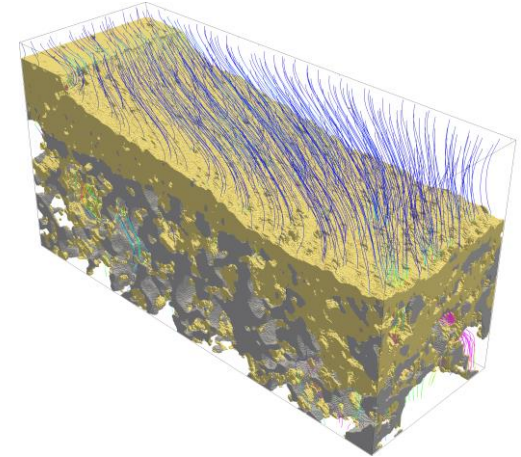
CF 1



CF 2



CF 3



Závěr

1. Micro-scale model coatované stěny filtru v OpenFoamu

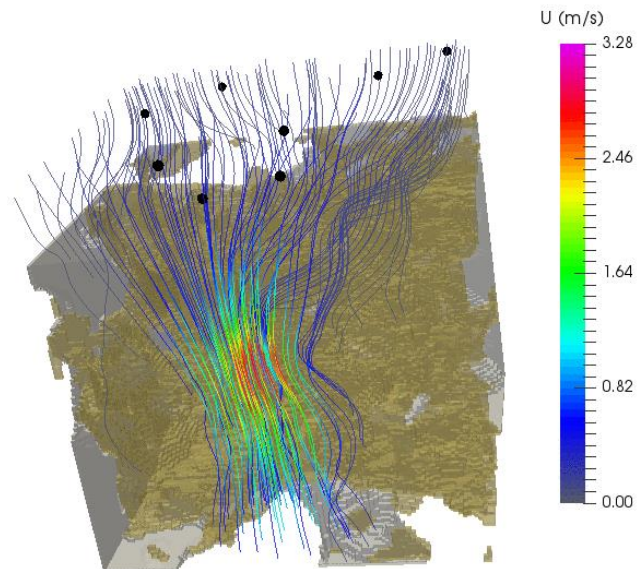
- Používá data z rentgenové tomografie

2. Aplikován na 3 reálné vzorky

- Vypočtena permeabilita a konverze
- Porovnání vzorků → výběr nejlepšího (CF2)

3. Budoucí práce

- Porovnání s měřenými tlakovými ztrátami
- Vytvoření modelu filtrace



Výsledky byly podpořeny z programu EU
Horizon 2020, PARTIAL-PGMs GA No. 686086.