

Simulation von Abgasnachbehandlungskomponenten

Bearbeitung

Fabian Fastabend
Florian Wolff

Kooperationspartner / Betreuer

Sandra Dusemund
Dr. Kay-Jochen Langeheinecke
IAV GmbH – Abteilung MD-S26, Gifhorn



Jan Tietjen
Zentrum für Technomathematik (ZeTeM)

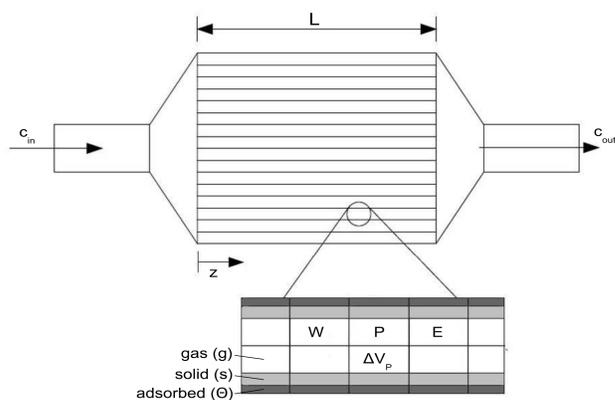


Problemstellung

Um die steigenden Abgasnormen zu erfüllen, benötigt man eine realistische Simulation von Abgaskatalysatoren. Die dafür genutzte mathematische Modellierung beruht auf der Diskretisierung und Vereinfachung von Masse- und Energieerhaltungsgleichungen gekoppelt mit einem Modell für chemische Reaktionen. Das resultierende gewöhnliche Differentialgleichungssystem ist sehr steif. Der verwendete Solver *stifbs* soll auf Stabilität und Laufzeit untersucht und mit anderen Solvern, die in die bestehende Simulation implementiert werden sollen, verglichen werden.

Modellierung

Der Katalysator wird diskretisiert und in drei unterschiedliche Gebietstypen *gas* (*g*), *solid* (*s*) und *adsorbed* (Θ) unterteilt:



Für jedes der Gebiete wird die Massenerhaltungsgleichung vereinfacht und mit dem Finite-Differenzenverfahren diskretisiert. Für jedes Volumenelement *P* ergibt sich ein autonomes Differentialgleichungssystem erster Ordnung:

$$\frac{\partial c_i^{(g)}}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \frac{1}{\Delta V_i} \dot{n}(c_{W,i}^{(g)} - c_i^{(g)}) + \frac{4}{d_k} \beta_i (c_i^{(s)} - c_i^{(g)})$$

$$\frac{\partial c_i^{(s)}}{\partial t} = \frac{\beta_i}{d_{wc}} (c_i^{(g)} - c_i^{(s)}) + \frac{1}{\rho} \sum_j \nu_{ij} r_j$$

$$\frac{\partial \Theta_k}{\partial t} = \frac{1}{\Gamma} \sum_j \nu_{kj} r_j$$

wobei $r_j = k_j(T) \prod_k c_k, k \in \{\text{Edukte der Reaktion } j\}$

Umsetzung

Steifheit des Systems

Das Maß der Steifheit einer DGL $y' = f(y(x))$ ist definiert als

$$S := \frac{\max_j (\Re(\lambda_j))}{\min_j (\Re(\lambda_j))} \quad \forall j : \Re(\lambda_j) < 0, \lambda_j \text{ sind die Eigenwerte von } \frac{\partial f}{\partial y}(y_0).$$

Untersuchung mit Testfällen aus Prüfstandsmessungen:

Testfall	S
StdSCR	$\sim 10^8$
SchSCR	$\sim 10^6$
NegSCR	$\sim 10^9$
FTPall	$\sim 10^{10}$
Steifheitsgrenze	$\sim 10^3$

⇒ Bei der Wahl des Solvers muss die Stabilität besonders berücksichtigt werden.

Vergleich von Solvern

Der Solver *stifbs* verwendet das linear-implizite Mittelpunktsverfahren und ist A-stabil sowie Isometrie erhaltend, aber nicht L-stabil. Zum Vergleich wurden die L-stabilen Verfahren *ode23s* und *Radau IIA* gewählt:

Bezeichnung	ode23s	Radau IIA
Typ	Rosenbrock-Typ-Verfahren	Voll-implizites Runge-Kutta-Verfahren
Butcher-Tableau	$\begin{array}{c cc} & 1 & \\ \hline \frac{1}{2+\sqrt{2}} & & \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2+\sqrt{2}} & \\ \hline 0 & 1 & \end{array}$	$\begin{array}{c ccc} & \frac{88-7\sqrt{6}}{360} & \frac{296-169\sqrt{6}}{1800} & \frac{-2+3\sqrt{6}}{225} \\ \hline \frac{296-169\sqrt{6}}{1800} & \frac{88+7\sqrt{6}}{360} & \frac{-2+3\sqrt{6}}{225} & \\ \hline \frac{16-\sqrt{6}}{36} & \frac{16+\sqrt{6}}{36} & \frac{1}{9} & \\ \hline \frac{16-\sqrt{6}}{36} & \frac{16+\sqrt{6}}{36} & \frac{1}{9} & \end{array}$
Konvergenzordnung	2	5
Stabilität	A- und L-stabil	A- und L-stabil

Beide Verfahren wurden implementiert getestet. Für die Testfälle hat sich *ode23s* gegenüber *Radau IIA* durchgesetzt.

Effizientere Jacobimatrix

Die Jacobimatrix ist dünn besetzt, hat eine spezielle Struktur und lässt sich teilweise analytisch berechnen:

$$J = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\rho} \frac{1}{\Delta V_1} \dot{n} - \frac{4}{d_k} \beta_1 & 0 & \frac{4}{d_k} \beta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\rho} \frac{1}{\Delta V_n} \dot{n} - \frac{4}{d_k} \beta_n & 0 & \frac{4}{d_k} \beta_n & 0 \\ \frac{\beta_1}{d_{wc}} & & & & \\ \vdots & & & & \\ 0 & \frac{\beta_n}{d_{wc}} & & & \\ \hline & 0 & & & * \end{bmatrix}$$

Die Struktur wird für ein effizienteres Lösen der Gleichungssysteme ausgenutzt.

Ergebnisse

Der implementierte Solver *ode23s* hat theoretisch und praktisch eine bessere Stabilität als *stifbs*. Die Rechenzeiten haben sich bei gleichen Ergebnissen deutlich verringert.

