

Your True Partner for CAE&CFD
ICSC2014



基于GT-POWER的 排气后处理模型的标定和匹配

郭子锐

IDAJ-China

本文来自:www.idaj.cn
谢绝未经IDAJ许可的转载!
技术咨询:support@idaj.cn

主要内容

- 排气后处理模拟的目的
- 排气后处理在GT-SUITE中的应用
- GT-SUITE中排气后处理模型的标定
- 系统集成（发动机，整车，XiL）
- GT-SUITE的实际应用的案例

Your True Partner for CAE&CFD
ICSC2014



排气后处理模拟的目的

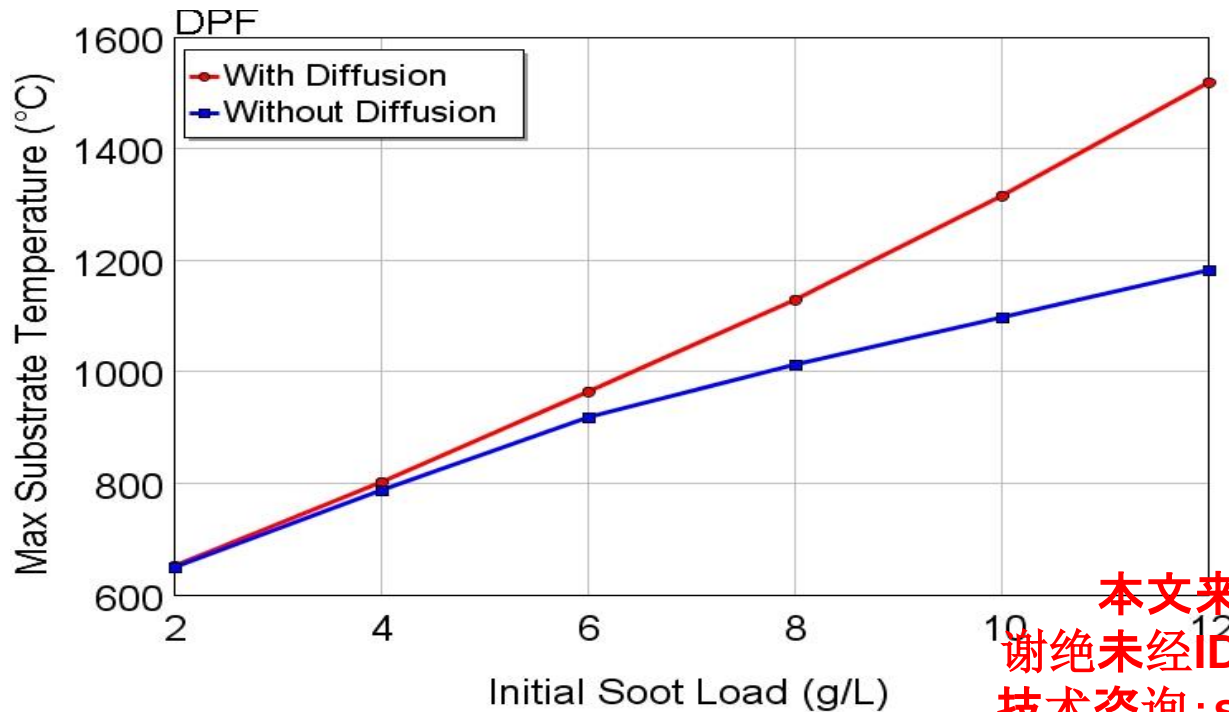
模拟目的

目标？

1. 最小化尾管的排放以满足汽车排放法规
2. 优化涂层，铂类金属负载量，催化器尺寸，降低成本等
3. 满足封装和压降要求
4. 最大化利用热能缩短起燃（light-off）时间，以及组分转化效率最大
5. 在极限温度下保护部件

案例：DPF中不可控再生，氧气扩散

- 降怠速（DTI）再生，温度迅速升高易导致部件烧损
- 氧气扩散对温度有显著影响
- 仿真目的 → 确定碳载量限值



本文来自: www.idaj.cn
谢绝未经IDAJ许可的转载!
技术咨询: support@idaj.cn

模拟目的

Catalysts	Filters
TWC (Three Way Catalyst)	DPF (Diesel Particulate Filter)
DOC (Diesel Oxidation Catalyst)	CDPF (Catalyzed DPF)
SCR (Selective Catalytic Reduction)	SCR-F (SCR on Filter)
AOC (Ammonia Oxidation Catalyst)	GPF (Gasoline Particulate Filter)
LNT (Lean NO _x Trap, NSRC, NAC)	FWC™ (Four Way Catalyst)

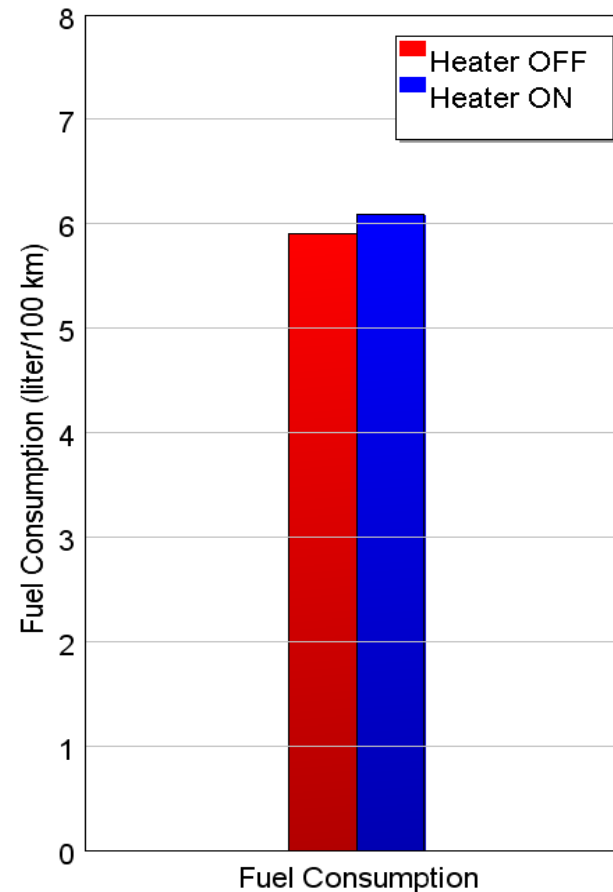
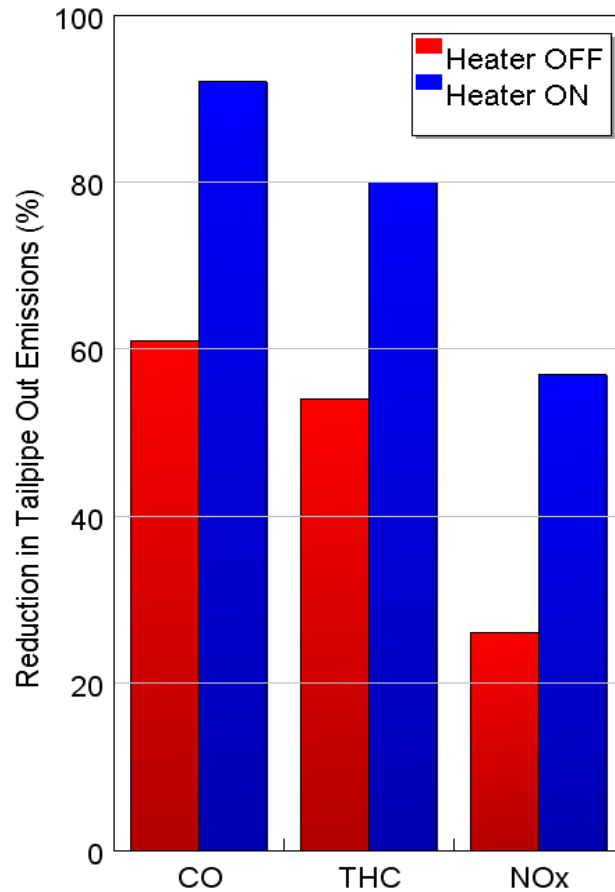
最佳布局设计?

- DOC+DPF+SCR, DOC+SCR+DPF, etc.
- Close-coupled cat, pre-turbine cat

什么样的控制策略?

- 再生频率, 尿素喷射率, 稀/浓燃循环?

案例：排放vs油耗的Trade off，NEDC，冷启动



**Fuel
Penalty
= 3%**

Your True Partner for CAE&CFD
ICSC2014



排气后处理在GT-SUITE中的应用

为什么用 GT-SUITE对尾气后处理进行模拟?

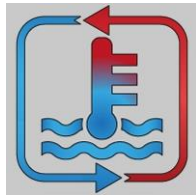
满足将来排放法规的要求，同时优化多个子系统如：

- 发动机
- 尾气后处理
- 整车
- 变速器
- 控制系统

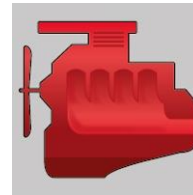
GT-SUITE构建了全面的耦合平台，整合各个独立的系统，研究整车经济性、整车排放和操控性之间的trade-off关系



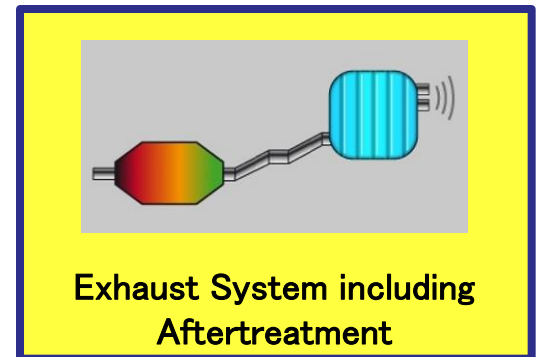
Driving Cycle
Vehicle Architecture



Warmup
Strategy



Engine

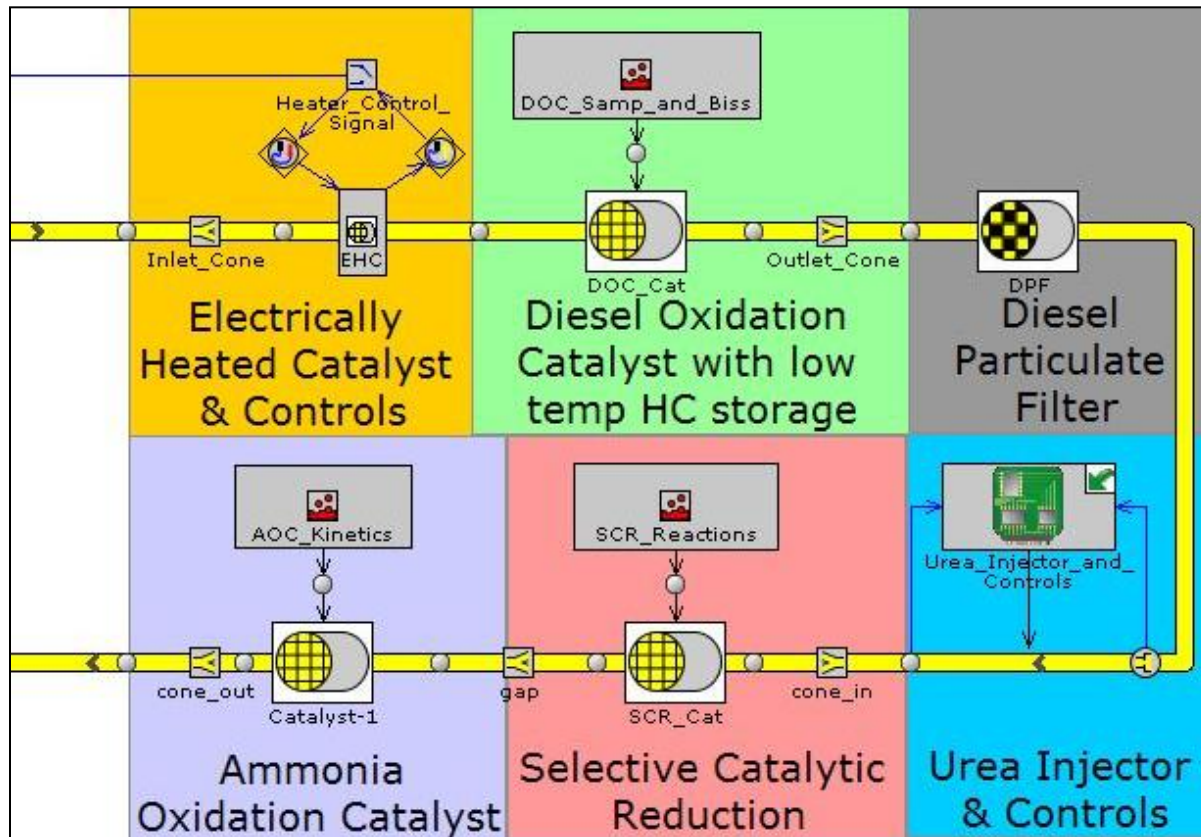


Exhaust System including
Aftertreatment

催化器仿真

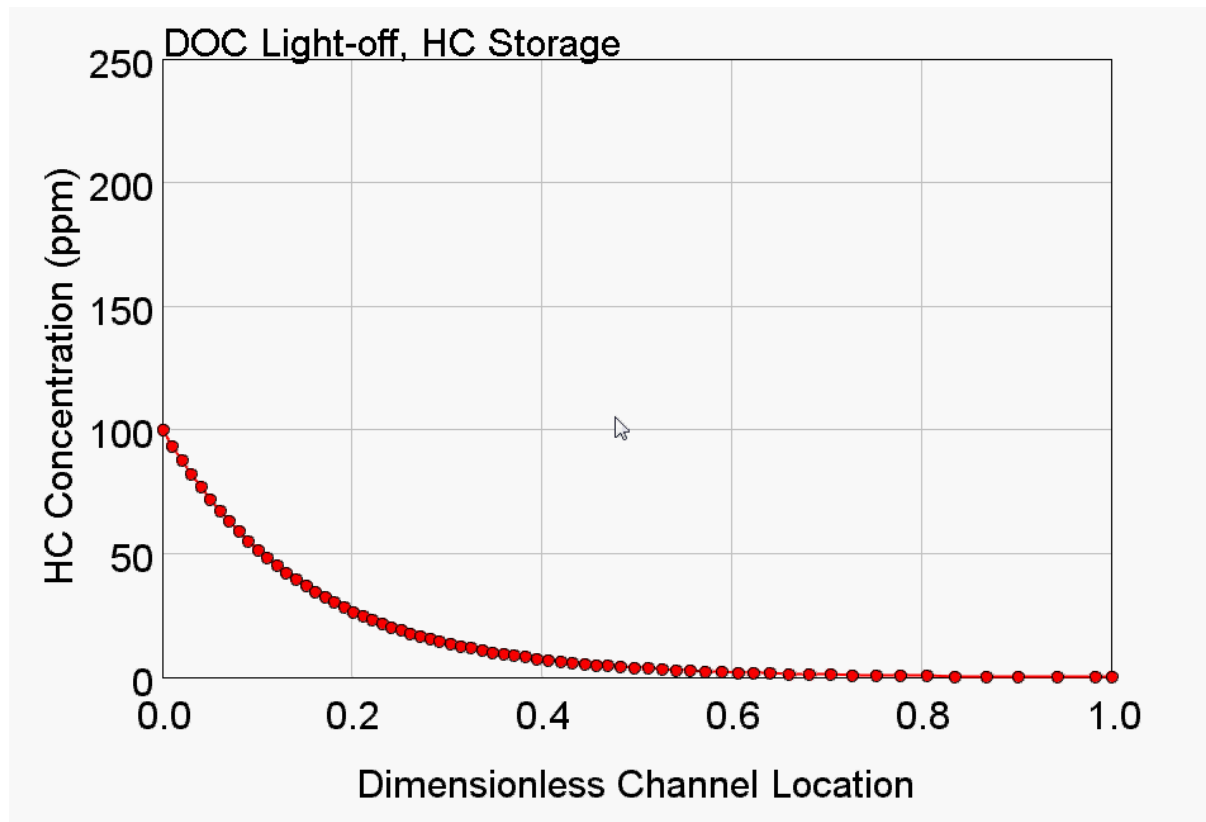
本文来自: www.idaj.cn
谢绝未经IDAJ许可的转载!
技术咨询: support@idaj.cn

- 排气后处理库包含在GT-POWER 和GT-SUITE 的license中
- 支持所有flow-through 式催化器和wall-flow 式的过滤器



Advanced Adaptive Solver

- 先进的适应性求解器，在反应前锋的自动网格加密
- 对大多数模型，计算速度是实时的10-1000倍。



排气后处理仿真

可进行哪些类型的仿真？

- 捕集器的压降测试
- 起燃（Light-off）测试
- 存储性能测试
- 瞬态驾驶循环（如NEDC, FTP, NRTC等），以及稳态工况点
- 结合厂商模型进行控制系统开发
- 新鲜 vs. 老化 vs. “中毒”的催化剂

Your True Partner for CAE&CFD
ICSC2014



GT-SUITE中排气后处理模型的标定

本文来自:www.idaj.cn
谢绝未经IDAJ许可的转载!
技术咨询:support@idaj.cn

反应机理设置界面

- 使用用户图形界面，灵活设定反应机理
 - 自由添加，删除，修改， turn on/off 任何反应
 - 无需编程，无需嵌入程序，无需编译，无需其他连接

Include Reaction	Associated Site Element	Reactants	Products	Pre-exponent Multiplier	Temperature Exponent	Activation Temperature or Energy	Concentration Expressions	Coverage Expressions
						kcal/kmol		
☒	Zeolite1 ...	Z1 + NH3 ...	Z1NH3 ...	0.657 ...	0 ...	0 ...	{NH3} ...	A(1) ...
☒	Zeolite1 ...	Z1NH3 ...	Z1 + NH3 ...	13.252 ...	0 ...	0 ...	G(1) ...	A(2) ...
☒	Zeolite1 ...	4Z1NH3 + 3O2 ...	2N2 + 6H2O + 4Z1 ...	3.04E+08 ...	0 ...	42470 ...	{O2}^0.5*G(2)^0.5 ...	A(2) ...
☒	Zeolite1 ...	4Z1NH3 + 4NO + O2 ...	4N2 + 6H2O + 4Z1 ...	1.69E+05 ...	0 ...	11640 ...	{NO}*{O2}^0.5*G(2)...	A(2) ...
☒	Zeolite1 ...	NO + 0.5O2 ...	NO2 ...	56.33 ...	0 ...	7420 ...	{NO}*{O2}^0.5*G(2)...	1 ...
☒	Zeolite1 ...	4Z1NH3 + 2NO + 2NO2 ...	4N2 + 6H2O + 4Z1 ...	1.53E+15 ...	0 ...	27020 ...	{NO2}*{NO} ...	A(2) ...
☒	Zeolite1 ...	8Z1NH3 + 6NO2 ...	7N2 + 12H2O + 8Z1 ...	7.28E+11 ...	0 ...	30000 ...	{NO2} ...	A(2) ...
☒	Zeolite2 ...	Z2 + NH3 ...	Z2NH3 ...	40 ...	0 ...	0 ...	{NH3} ...	A(3) ...
☒	Zeolite2 ...	Z2NH3 ...	Z2 + NH3 ...	19731600 ...	0 ...	22044 ...	1 ...	A(4) ...
☒	Zeolite2 ...	4Z2NH3 + 3O2 ...	2N2 + 6H2O + 4Z2 ...	3.04E+08 ...	0 ...	42470 ...	{O2}^0.5*G(2)^0.5 ...	A(4) ...

- 支持多活性位的机理，以及non-Arrhenius 反应速率

Site Element Name		PGM ...	cerium ...	barium ...	barium_low ...
Site Density Option #1					
Active Surface Site Density	mol/m^3	ign ...	90 ...	14 ...	14 ...
Site Density Option #2					
Loading of Site Element	g/ft^3	113 ...	ign ...	ign ...	ign ...
Atomic Weight (g/mol)		158 ...	ign ...	ign ...	ign ...
Dispersion Factor		0.12 ...	ign ...	ign ...	ign ...

Ammonia desorption rate, function of NH₃ coverage, $A(2) = \theta_{\text{NH}_3}$

$$\exp(-39564.2/8.314/T*(1-0.89*A(2)))$$

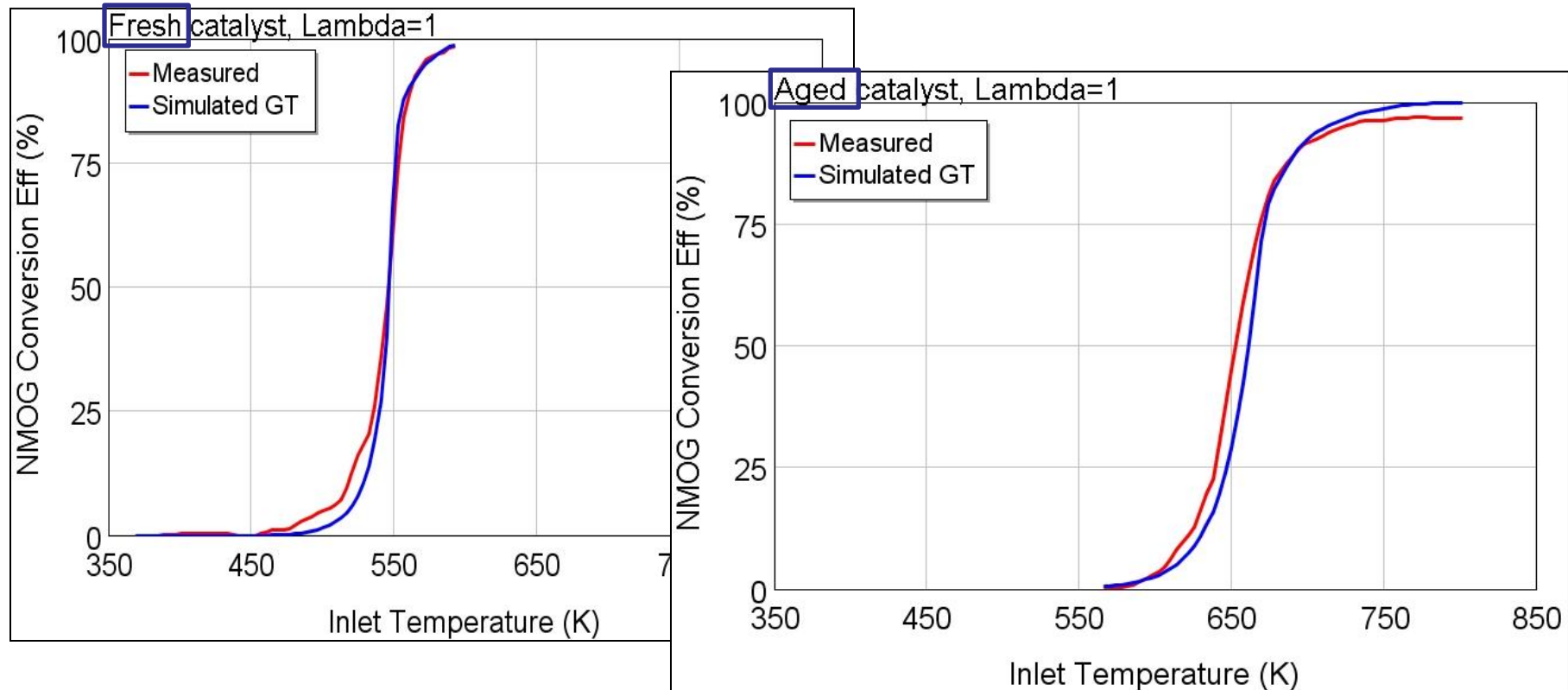
案例1: Fresh vs. Aged 的TWC, Light-Off 测试

- 建立新鲜催化剂的动力学模型
- 对“老化”的催化剂需要修正两个参数:
 - PGM Dispersion Factor
 - H_2 oxidation pre-exponent

Attribute	Unit	1	2
Site Element Name		cerium	PGM
Site Density Option #1			
Active Surface Site Density	mole / m ³	50	0.35
Site Density Option #2			
Loading of Site Element	g/cm ³	ign	ign
Atomic Weight (g/mol)		140	195
Dispersion Factor		ign	ign

At...	Include Reaction	Associated Site Element	Reactants	Products	Pre-exponent Multiplier	Temp Ex
Unit						
1	☒	PGM	C0+0.502	C02	5.542E13	
2	☒	PGM	C3H6+4.502	3C02+3H20	1.917E15	
3	☒	PGM	C3H8+502	3C02+4H20	6.404E15	
4	☒	PGM	H2+0.502	H20	1.814E15	
5	☒	PGM	C0+NO	C02+0.5H2	2.857E9	
6	☒	PGM	C3H6+9NO	3C02+3H20+4.5H2	2.994E11	
7	☒	PGM	H2+NO	H20+0.5H2	7.88E10	
8	☒	PGM	C0+H20	C02+H2	180000	

案例1: Fresh vs. Aged 的TWC, Light-Off 测试



Ref.: "A discussion of transport phenomena and three-way kinetics of monolithic converters," Holder, Bollig, Anderson, Hochmuth, 2006, Chemical Engineering Science, 61.

案例2: DPF Pressure Drop

➤ Clean DPF中标定的参数:

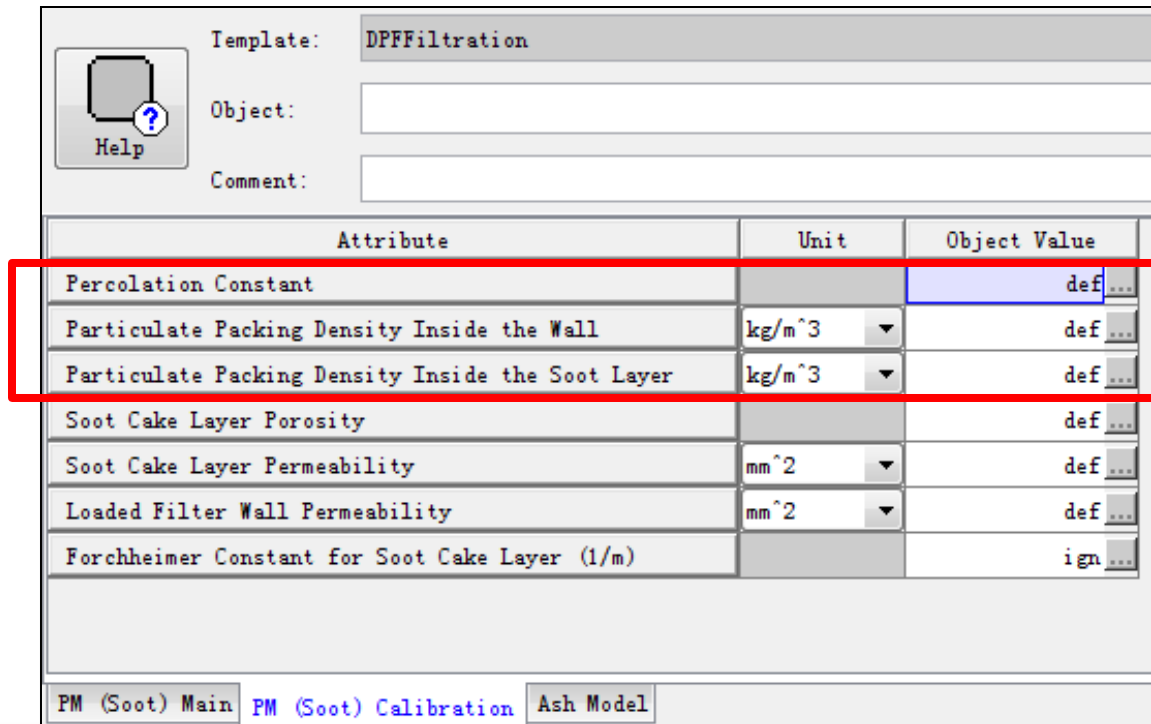
- Clean Filter Wall Permeability, 推荐在 $1e-13$ 至 $1e-12$ m²之间
- 有时也会用到Contraction/Expansion Pressure Drop Coefficient

Attribute	Unit	Object Value
Clean Filter Wall Permeability	mm ²	2E-6
Pore Diameter	micron	12.5
Filter Porosity		0.48
Contraction Pressure Drop Coefficient		ign
Expansion Pressure Drop Coefficient		ign
Forchheimer Constant for Wall (1/m)		ign
Channel Pressure Drop Correlation		def
Pressure Drop Multiplier (Obsolete)		def

Main Pressure Drop Modeling Options

案例2: DPF Pressure Drop

- 对DPF中碳烟沉降过程标定三个主要参数:
- percolation constant (过滤常数), 一般在0.85至0.95间, def = 0.9
 - Particulate Packing Density Inside the Wall/the Soot Layer



Attribute	Unit	Object Value
Percolation Constant		def...
Particulate Packing Density Inside the Wall	kg/m ³	def...
Particulate Packing Density Inside the Soot Layer	kg/m ³	def...
Soot Cake Layer Porosity		def...
Soot Cake Layer Permeability	mm ²	def...
Loaded Filter Wall Permeability	mm ²	def...
Forchheimer Constant for Soot Cake Layer (1/m)		ign...

PM (Soot) Main PM (Soot) Calibration Ash Model

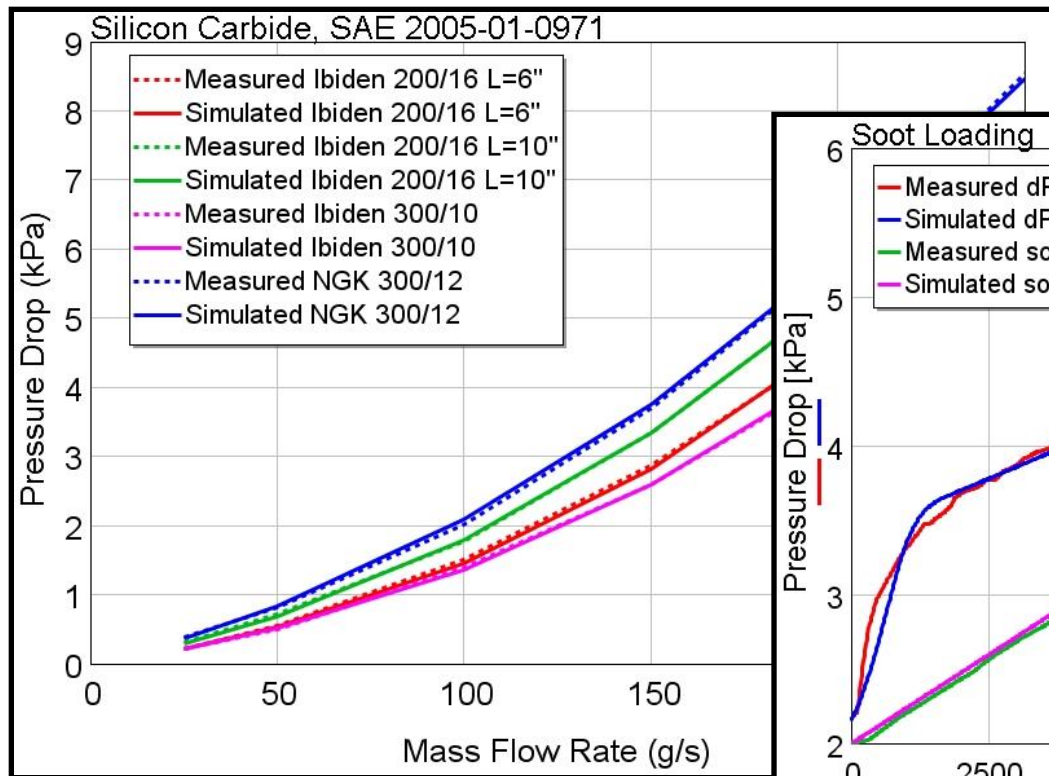
案例2: DPF Pressure Drop

本文来自: www.idaj.cn

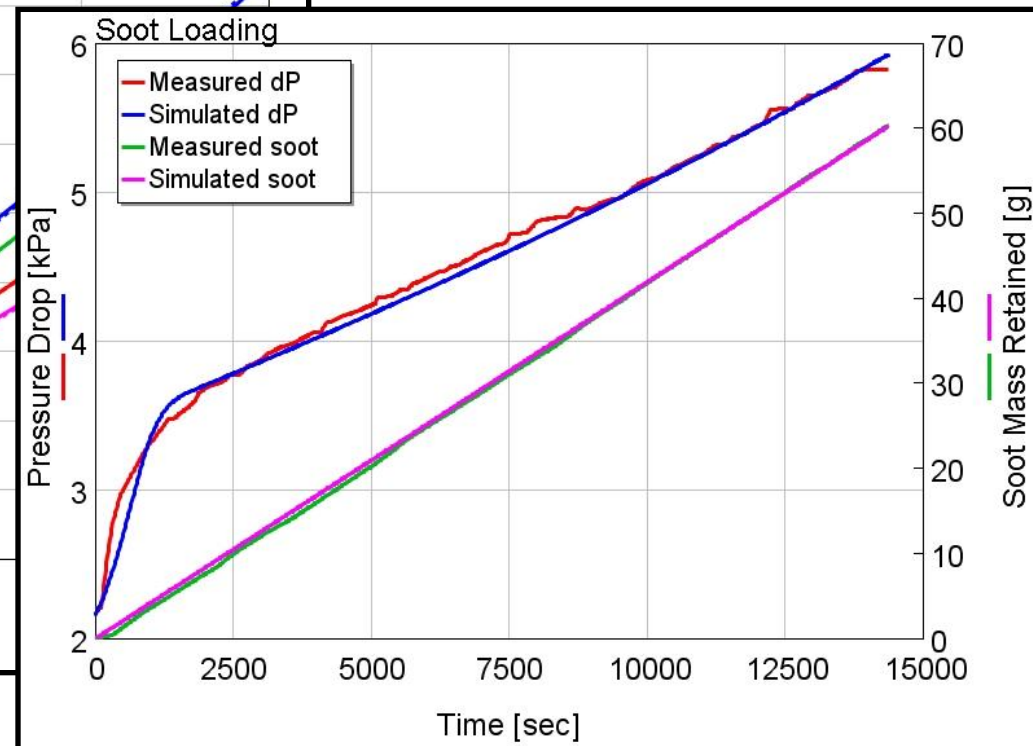
谢绝未经IDAJ许可的转载!

技术咨询: support@idaj.cn

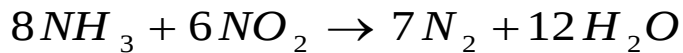
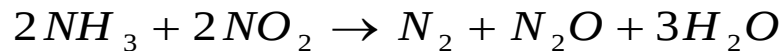
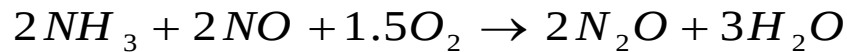
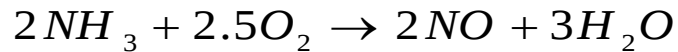
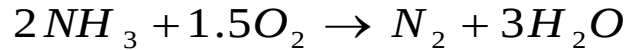
干净的DPF的压降



碳烟沉积后的压降



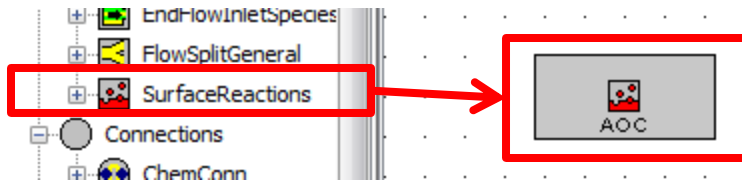
案例3:AOC系统（氨的催化氧化）



$$R = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

2 Rate Constants per Reaction
+ 2 Inhibition Constants

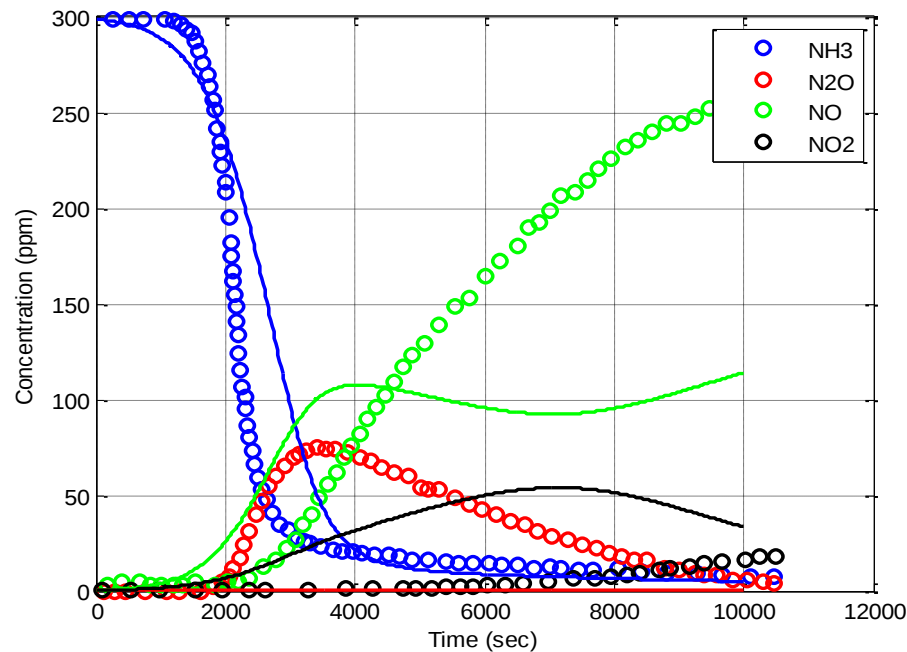
= 14 Total Parameters



Reactants	Products	Pre-exponent Multiplier	Temperature Exponent	Activation Temperature or Energy	Concentration Expressions
				K	
2NH3+1.5O2	N2+3H2O	2.27248E18	0	19010	{NH3}*{O2}/G(1)
2NH3+2.5O2	2NO+3H2O	3.20111E25	0	27193	{NH3}*{O2}/G(1)
2NH3+2NO+1.5O2	2N2O+3H2O	4.52064E20	0	18205	{NH3}*{NO}*{O2}/G(1)
NO + 0.5O2	NO2	1.11486E7	0	5253	(({NO}*sqrt({O2})-{NO2}*G(2)/G(3))/G(1)
2NH3 + 2NO2	N2 + N2O + 3H2O	6.26758E13	0	6532	{NH3}*{NO2}

案例3:AOC系统（氨的催化氧化）

- 对于化学反应的标定实际上是一个寻优过程，一般借助第三方优化软件完成，如Mode frontier
 - 变量：多个反应参数
 - 优化目标：仿真和试验数据之间的误差最小化



案例3:AOC系统（氨的催化氧化）

- Expression Basis推荐使用turnover number，标定好模型后，方便再次使用

Attribute	Unit	Object Value
Species Translation Object		species_trans ...
Rate Expression Basis		turnover number ▼
Concentration Specification		mole/m3 ▼
Diffusion		quasi-steady ▼
EDF Diffusion Correction (EDF Solver Only)		☒

[Main](#) | [Solver Options](#) | [Site Elements](#) | [Coverages A\(i\)](#) | [Reactions](#) | [General and Inhi](#)

Your True Partner for CAE&CFD
ICSC2014

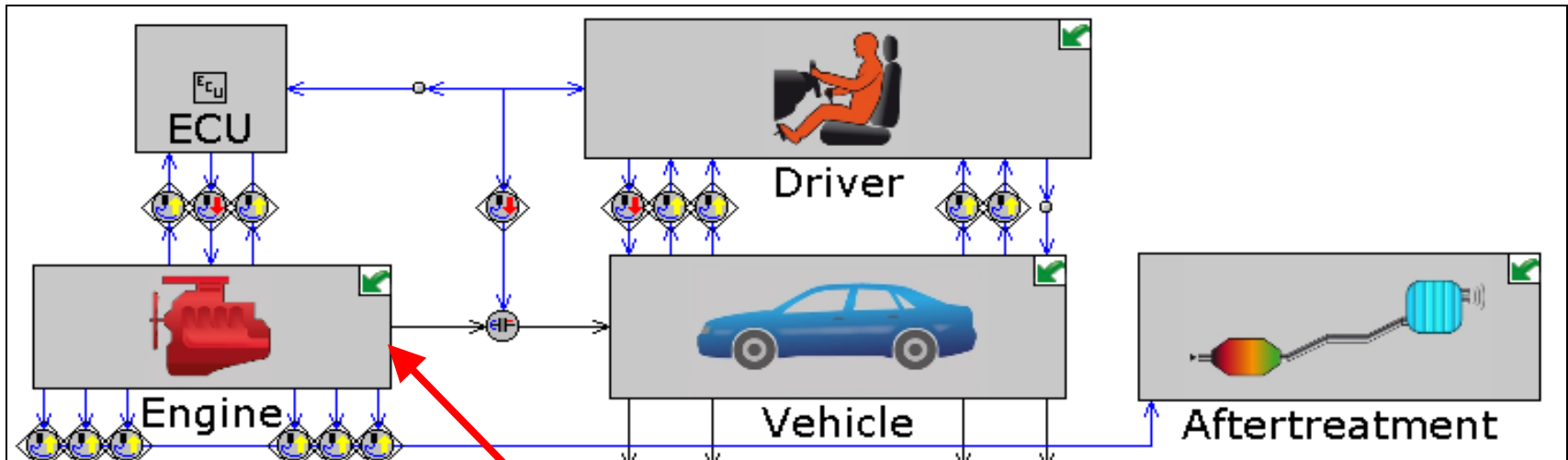


系统集成（发动机，整车，XiL）

本文来自：www.idaj.cn
谢绝未经IDAJ许可的转载！
技术咨询：support@idaj.cn

集成建模

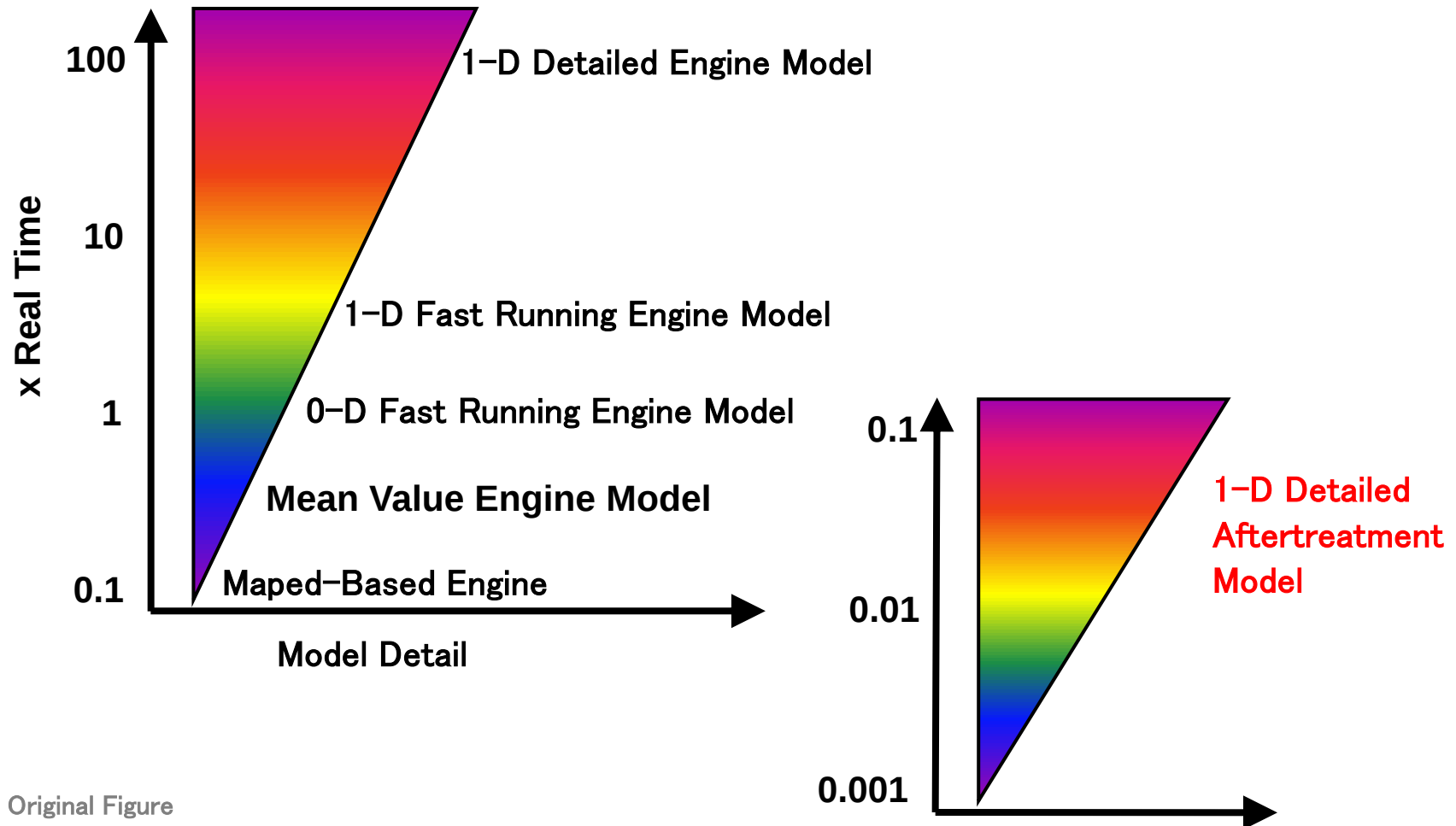
- 在GT中，仅需一个license即可在一个模型中集成所有的系统



Can be any of the following:

- 1) 详细的发动机
- 2) 快速运转模型 (FRM)
- 3) 平均值发动机 (MV)
- 4) 基于map的发动机 (Map-based)

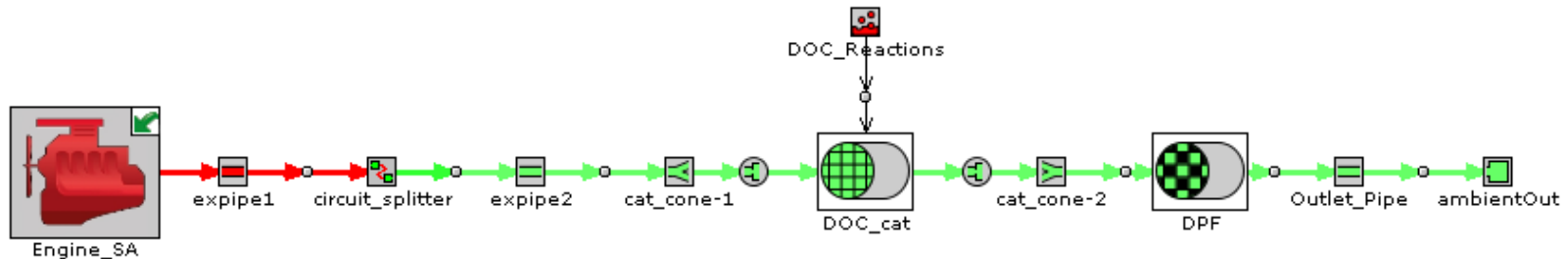
发动机模型计算时间vs. 精度



Original Figure
Provided by FEV

详细发动机+ 后处理

- 每一个回路可以使用最优的求解器和时间步长
 - 发动机部分（显示求解器）时间步长~1个曲轴角度
 - 后处理部分（准稳态求解器）时间步长~1秒

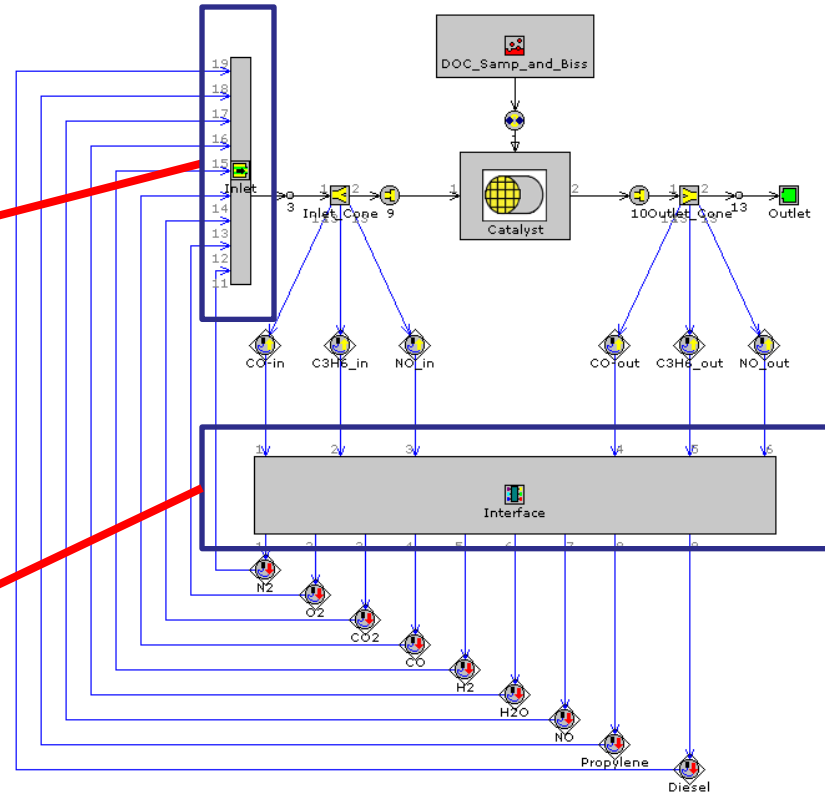
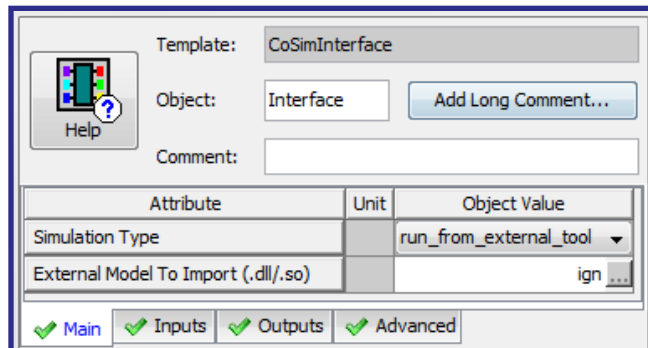
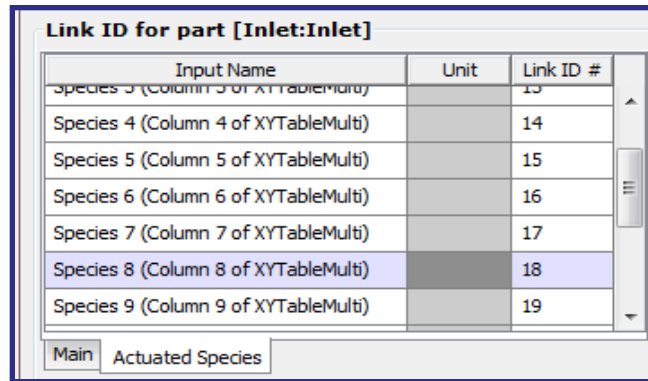


- 关于回路、流动求解器及时间步长在Run Setup中定义

Attribute	Unit	Flow Settings #1	Flow Settings #2
Part Name List Object Identifying Circuits Belonging to Column		exp_parts ...	qs_parts ...
Time Control Flag		From_TimeControl	From_TimeControl
Solution Method		explicit	quasi-steady
Time Step and Solution Control Object		def ...	qs ...
Flow Settings Object for Real Gas, Friction, Heat Transfer		flowSettingsDef ...	steady ...
TimeControl Initialization FlowControl ODEControl ThermalControl ConvergenceRLT			

与第三方工具的集成（如Simulink）

- 在边界EndFlowInletSpecies中的输入均可：
 - 由控制信号控制
 - 指向Excel或者TXT文件



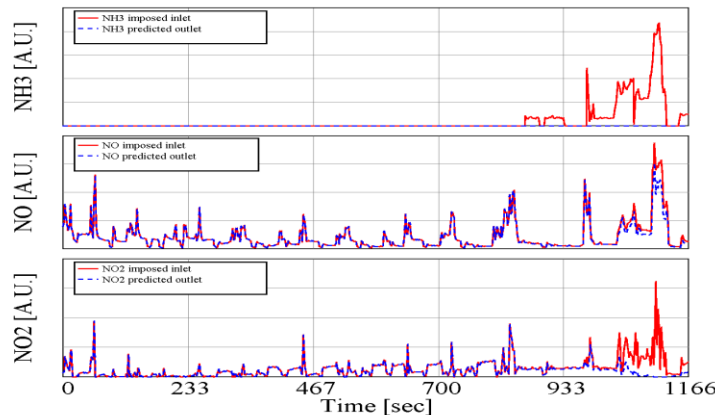
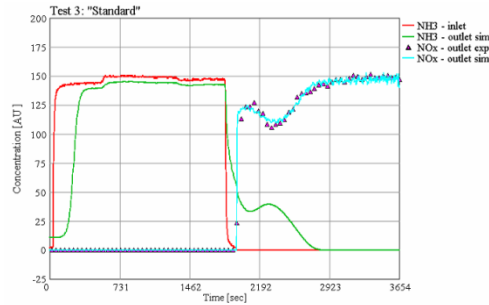
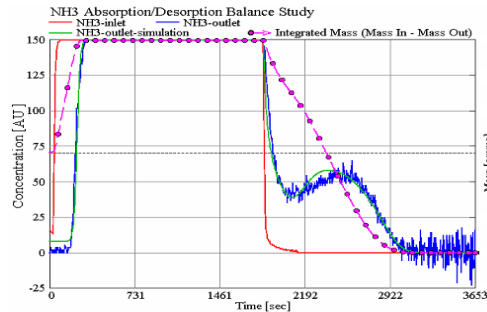
Your True Partner for CAE&CFD
ICSC2014



GT-SUITE的实际应用的案例

Zeolite类SCR

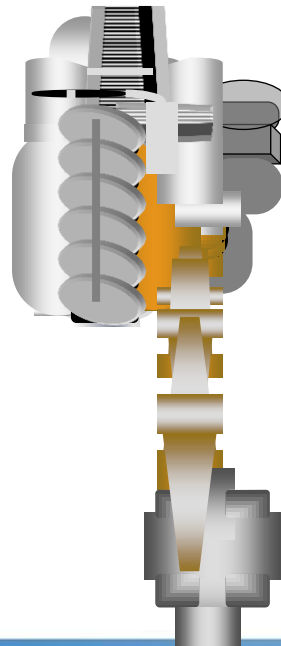
存储性能



NOx 转化率:

Predicted
37%

Measured
38%



Objectives

Zeolite类SCR催化剂，反应动力学相关的参数使用试验获得，如TPD

Added Value

化学机理模板库直观且灵活:

- 1) 表面反应包括氨的吸附和脱附
- 2) 催化剂的瞬态特性

Approach

使用内置的直接优化确定反应动力学参数，使用准稳态 (Q-S) 求解器，计算速度可达实时运行的100倍

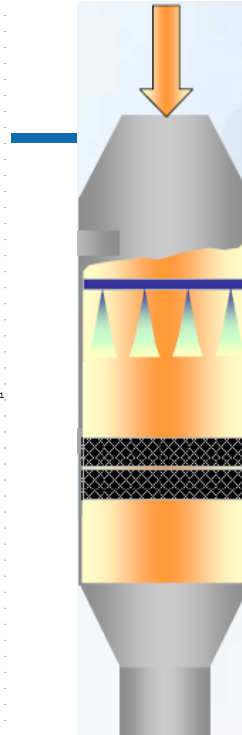
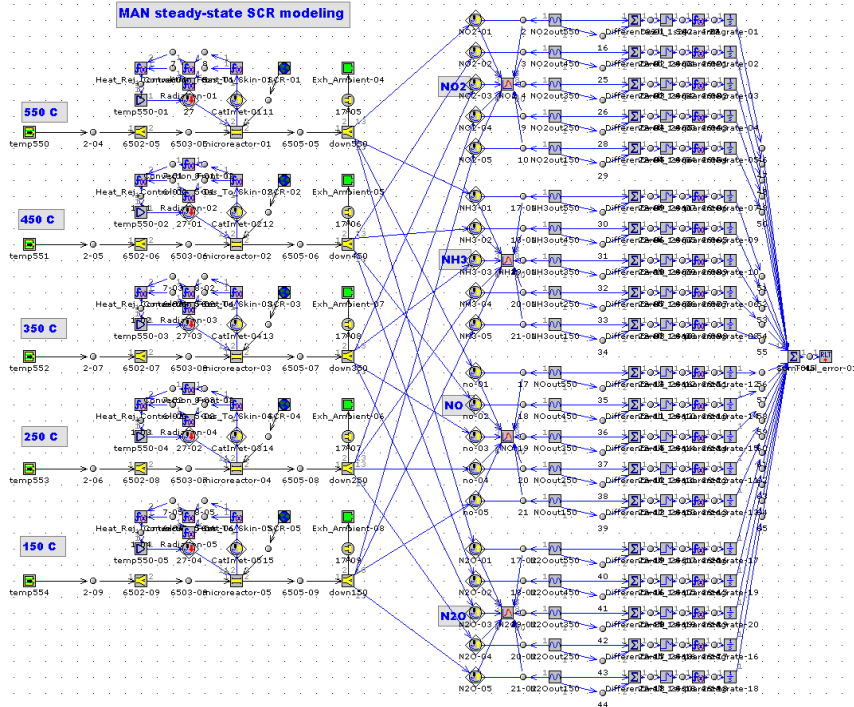
Results

模拟在NEDC循环下SCR的瞬态性能，软件预测结果与试验进行对比，误差在1%以内



SCR稳态模拟

MAN steady-state SCR modeling



Objectives

模拟研究在不同的温度下，NH₃/NO比对NO还原效果的影响

Value Proposition

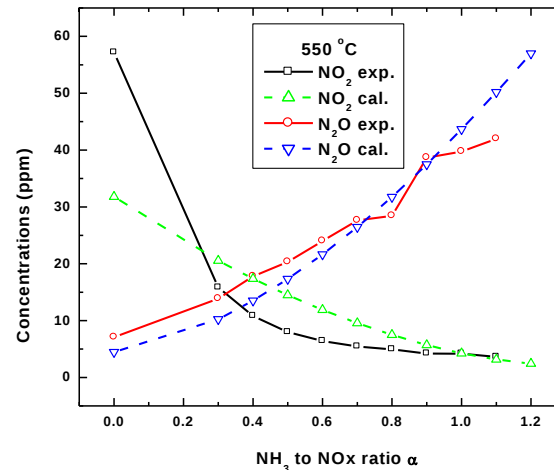
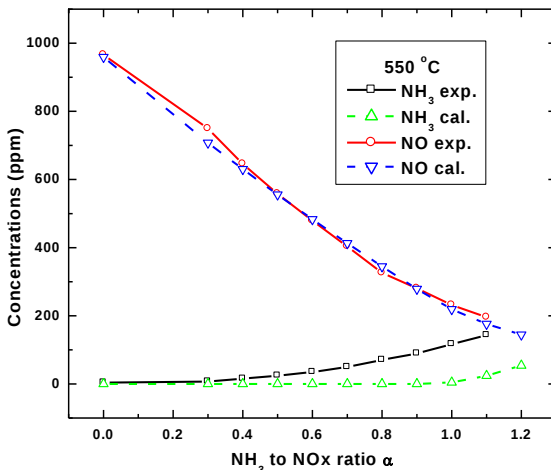
模拟SCR反应，NO氧化，以及微量产物（如N₂O）的生成等

Approach

在每一个温度下，以一系列的稳态试验的催化器入口气体组分，作为单个连续的瞬态边界条件。结合在NH₃/NO = 0 下的试验数据，计算NO氧化生成N₂O的反应速率

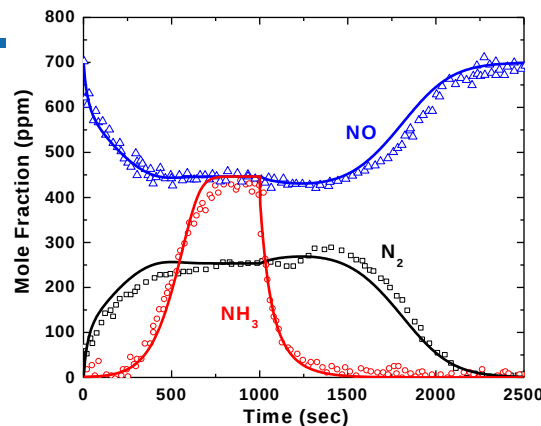
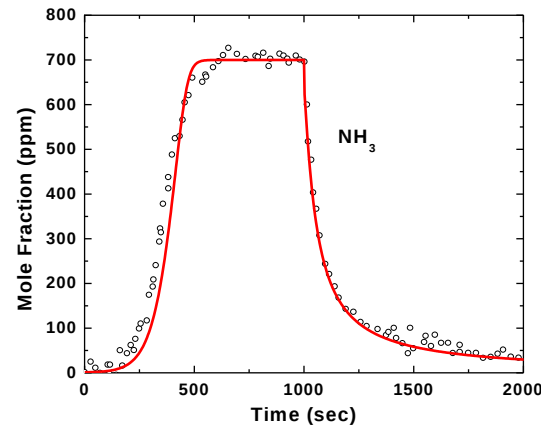
Results

在所有试验温度范围内，NO的转化率均能达到很好的吻合，微量组分的预测在加入N₂O相关的机理后，精度提高



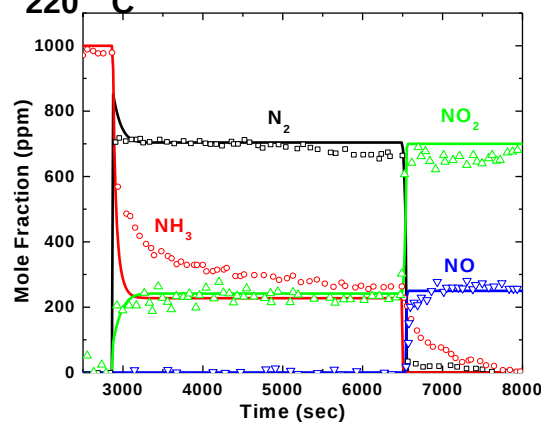
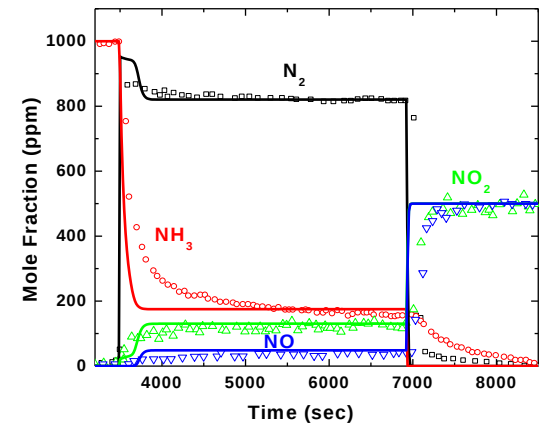
DAIMLER 瞬态Vanadium类SCR 模拟

$V_2O_5-WO_3/TiO_2$ based SCR system



**NH3 = 700 ppm; T = 220° C

**NH3/NO = 700/700 ppm; T = 220° C



*NO/NO2/NH3 = 500/500/1000 ppm;
T = 225° C

*NO/NO2/NH3 = 250/700/1000 ppm
T = 275° C

Objectives

- 建立 $V_2O_5-WO_3/TiO_2$ 类SCR 系统，研究瞬态 NO_x 还原策略

Added Value

- 在GT-Power中创建模型（未使用用户程序或其他第三方软件）
- 模型可以直接与详细发动机模型集成

Approach

- 使用内置的化学动力学模板库，研究NH3在瞬态过程对SCR性能的影响。
- 使用准稳态(quasi-steady)求解器可进行快速运算

Results

- 与试验结果达到很好的
- 运算速度为实时运算的10倍



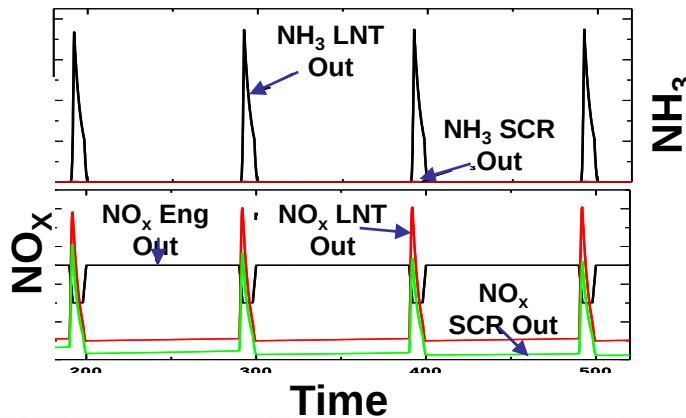
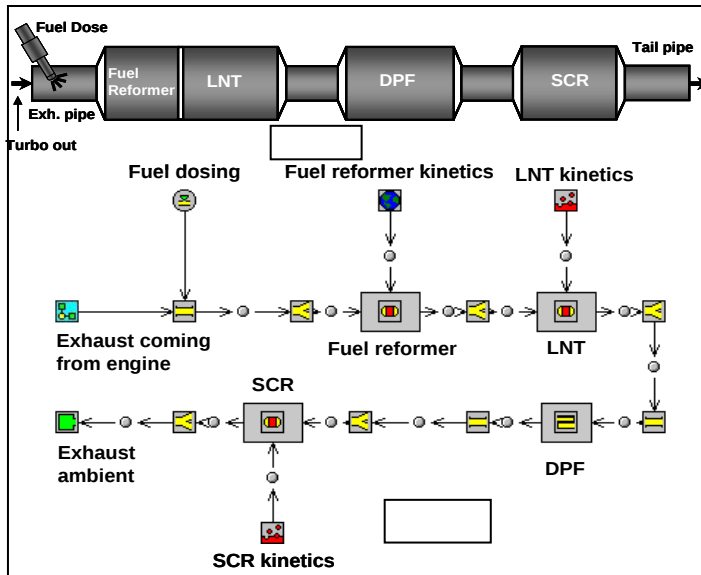
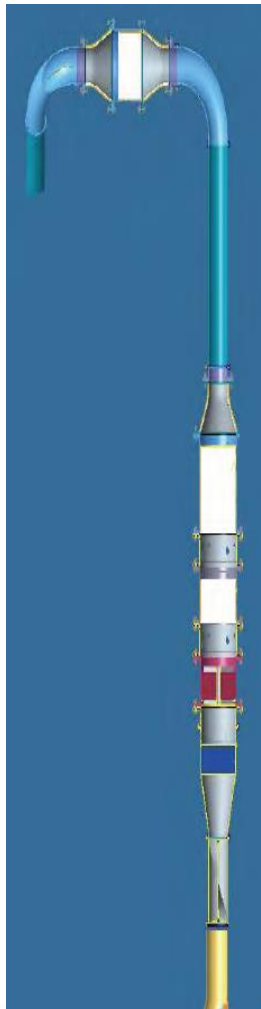
NO_x 控制

Fuel Reformer + LNT + DPF + SCR

本文来自: www.idaj.cn

谢绝未经IDAJ许可的转载!

技术咨询: support@idaj.cn



Objectives

- 模拟多个NO_x还原装置系统, 包括:
Fuel Reformer + LNT + DPF + SCR
- NO_x 还原不使用尿素

Added Value

- 在单一工具内集成多个尾气后处理装置以及控制系统
- 研究再生策略。
如何时喷射燃料?
- 研究各装置的排布:
如将DPF 置于 LNT之后??

Approach

- 使用GT-Power中灵活的化学动力学库
- 使用准稳态求解器

Results

- 运算速度为实时运算的10倍

Your True Partner for CAE&CFD
ICSC2014



谢 谢 !