



## Seminář SIAM Student Chapter

Doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

# Matematické modelování automobilových katalyzátorů

středa **25. listopadu 2015** od **14 hodin**  
v seminární místnosti KNM, 4. patro

**Abstrakt:** Automobilové katalyzátory jsou klíčové pro ochranu ovzduší, zejména v aglomeracích s vysokou hustotou silniční dopravy. Chemické reakce v katalyzátoru umožňují odstranění toxických složek z výfukového plynu - jedná se zejména o redukci oxidů dusíku (NO<sub>x</sub>) a oxidaci CO, nespálených uhlovodíků a částic sazí. Tyto reakce se odehrávají na povrchu nanočástic katalytických kovů, které jsou rozmístěny v porézní vrstvě (tzv. washcoat) na stěnách jednotlivých kanálků uvnitř voštinové struktury - monolitu. Celková účinnost je dána jak vlastní reakční kinetikou, tak i transportem složek z proudícího plynu do porézní katalytické vrstvy (viz obrázek). Pro návrh účinného automobilového katalyzátoru i řízení jeho funkce za podmínek reálného provozu jsou zásadní efektivní matematické modely. Podrobný model porézní vrstvy využívá 3D rekonstrukci s využitím diskretní fázové funkce. Celkový model kanálku je pak nejčastěji formulován jako prostorově jednorozměrný. Modely jsou obecně založeny na nestacionárních bilancích hmoty a entalpie ve formě soustav parciálních diferenciálních rovnic parabolického typu, přičemž členy reakčních rychlostí vnášejí do systému značnou nelinearitu. V rámci přednášky budou představeny metody využívané pro numerické řešení modelů automobilových katalyzátorů i jejich praktické využití.

