

Diss. ETH No. 18426

MODELING AND CONTROL OF THREE-WAY CATALYSTS

A dissertation submitted to

ETH Zurich

for the degree of

Doctor of Sciences

presented by

Roman Jörg Möller

Dipl. Masch.-Ing. ETH

born 30 January 1979

citizen of Zurich, ZH

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Lino Guzzella, examiner

Prof. Dr.-Ing. Gerhart Eigenberger, co-examiner

Abstract

Increased concerns about automotive pollution in the last 30 years have led to very stringent emission standards. For gasoline engines, three-way catalysts are today's most successful pollution abatement system. Inside the catalyst NO_x , CO, and partial oxidized hydrocarbons are converted to CO_2 and H_2O . Three-way catalysts can reach very high conversion rates if the exhaust gases exiting the engine are kept within a narrow band around stoichiometry. However, short deviations from stoichiometric conditions cannot be avoided during the transient operation of the engine, which is the case under real world driving conditions. To prevent a breakdown of the conversion rates in the transient case, the oxygen storage property of three-way catalysts, combined with a precise control of the air-to-fuel ratio and of the filling state of the catalyst, is essential. Especially the control of the filling state is demanding, since the filling state cannot be measured directly and therefore has to be estimated. Additionally, the complex dynamic behavior of three-way catalysts can cause stability problems of the catalyst controller. Accurate simulation models are therefore a promising way to gain a deeper understanding of the dynamic effects occurring during the transient operation of a three-way catalyst and to optimize and evaluate controller designs.

In this thesis it is demonstrated that the main shortcoming of most existing models is the way they model the oxygen storage dynamics. Based on this knowledge a dynamic one-channel model of a three-way catalyst is developed. The model is based on a surface reaction mechanism, including a new oxygen storage mechanism, that considers the effect of H_2O and CO_2 on the oxygen storage dynamics. Due to H_2O and CO_2 in the exhaust gas, the filling state of the oxygen storage under rich conditions is controlled by the equilibrium between ceria reduction by CO and H_2 and oxidation by H_2O and CO_2 . For the reaction rates, a parametrization is used that ensures the thermodynamic consistency of the chemical model. Due to these improvements of standard models the transient behavior of the downstream air-to-fuel ratio can now

be described correctly. Since the downstream λ sensor is the only available sensor after the TWC, this improvement is of eminent importance for the control design. The described model improves the understanding of λ control with a downstream λ sensor as it is applied in most of today's gasoline vehicles. The dynamic model is validated using experimental data from both a model-gas test bench and an engine test bench.

In a second part the model is applied to the implementation of a catalyst controller that controls the oxygen storage distribution of the catalyst to a steady state profile. Based on the detailed chemical model a control-oriented model is derived which can be used for the design of the catalyst controller. The potential of the controller is demonstrated using a simulation environment that allows closed loop simulations of a driving cycle. The catalyst model is also applied to the optimization of a feed-forward strategy aiming at a quick depletion of the oxygen storage level after a fuel cut-off without generating rich emissions.

Zusammenfassung

Wachsende Bedenken über die negativen Umwelteinflüsse der Schadstoffemissionen, verursacht durch den Automobilverkehr, führten in den letzten 30 Jahren zu immer strengeren Emissionsstandards. Drei-Wege Katalysatoren sind heute das meistverwendete Abgasnachbehandlungssystem für Benzinmotoren. Im Katalysator werden NO_x , CO und unverbrannte Kohlenwasserstoffe zu CO_2 und H_2O konvertiert. Drei-Wege Katalysatoren erreichen sehr hohe Konversionsraten, für den Fall, dass das Abgas des Motors in einem engen Band um stoichiometrische Bedingen gehalten wird. Allerdings sind kurze Abweichung von stoichiometrischen Bedingen nicht vermeidbar beim transienten Betrieb des Motors, wie er unter realen Fahrbedingungen auftritt. Um ein Zusammenbruch der Konversionsraten im transienten Fall zu vermeiden ist die Sauerstoffspeicherfähigkeit von Drei-Wege Katalysatoren kombiniert mit einer präzisen Regelung des Sauerstoff zu Brennstoff Verhältnisses und des Füllstandes des Katalysators entscheidend. Insbesondere die Regelung des Füllstandes ist schwierig, da der Füllstand nicht direkt gemessen werden kann und daher geschätzt werden muss. Dazu kommt, dass das komplexe dynamische Verhalten von Drei-Wege Katalysatoren Stabilitätsprobleme des Katalysatorreglers verursachen kann. Präzise Simulationsmodelle sind daher ein vielversprechender Ansatz um das Verständnis der dynamischen Effekte, die beim Betrieb des Katalysators auftreten, zu vertiefen und um verschiedene Reglerkonzepte zu evaluieren und optimieren.

In dieser Doktorarbeit wird gezeigt, dass die Hauptschwäche der meisten existierenden Katalysatormodelle die Art ist, wie die Sauerstoffspeicherdynamik modelliert wird. Basierend auf dieser Erkenntnis wurde ein dynamisches 1-Kanalmodell eines Drei-Wege Katalysators entwickelt. Das Modell basiert auf einem Oberflächen-Reaktionsmechanismus, bei dem ein neuer Sauerstoffspeichermechanismus integriert wurde. Dieser Speichermechanismus berücksichtigt den Effekt von H_2O und CO_2 im Abgas. Durch H_2O und CO_2 wird der Sauerstofffüllstand unter fetten Abgasbedingungen durch

das chemische Gleichgewicht zwischen Cer-Reduktion durch CO und H₂ und Cer-Oxidation durch H₂O und CO₂ bestimmt. Für die Reaktionsraten wurde eine Parametrierung verwendet, die die thermodynamische Konsistenz des chemischen Modells garantiert. Diese Verbesserungen gegenüber existierenden Modellen erlauben nun die korrekte Beschreibung des dynamischen Verhaltens des Luft zu Brennstoff Verhältnisses hinter dem Katalysator. Da die Messung dieses Verhältnisses durch den λ Sensors hinter dem Katalysator das einzige verfügbare Signal ist, sind diese Verbesserungen des Katalysatormodells von grosser Bedeutung. Das beschriebene Modell trägt zudem zu einem verbesserten Verständnis bei, wie ein Katalysatorregler, wie er heute in den meisten Fahrzeugen eingesetzt wird, funktioniert. Das dynamische Modell wurde sowohl anhand von Messungen an einem Motorenprüfstand als auch anhand von Messungen an einem Modellgasprüfstand validiert.