

Προσομοίωση καταλυτών καυσαερίων αυτοκινήτων με ab-initio μικρο-κινητικό μοντέλο**Τεμπλής Χ.*¹, Αλεξόπουλος Κ.², Βλάχος Δ.² και Παπαγιαννάκος Ν.¹**¹Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Σχολή Χημικών Μηχανικών, Ηρώων Πολυτεχνείου 9, 15780 Ζωγράφου, Αθήνα, Ελλάδα²Department of Chemical Engineering and Center for Catalytic Science and Technology, University of Delaware, Newark, DE 19716, United States

(* valantis2010@yahoo.gr)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η αυξανόμενη ανησυχία σχετικά με τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις της εκπομπής ρύπων καυσαερίων έχει οδηγήσει σε όλο και πιο περιοριστικούς κανονισμούς, οι οποίοι επιβάλλουν την ανάπτυξη ολοένα και πιο αποδοτικών συστημάτων επεξεργασίας καυσαερίων και καταλυτικών μετατροπών. Στις εφαρμογές κινητήρων βενζίνης, η τοξικότητα των εκπομπών καυσαερίων μειώνεται με τη χρήση καταλυτικών μετατροπών μετά την καύση. Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η προσομοίωση καταλυτικού μετατροπέα αυτοκινήτου χρησιμοποιώντας ab-initio μικρο-κινητικό μοντέλο για την αντίδραση του CO με το NO και το O₂ σε καταλύτη Pd/Al₂O₃.

Το ab-initio μικρο-κινητικό μοντέλο αναπτύχθηκε στο Πανεπιστήμιο του Delaware και αποτελείται από συνολικά 27 αμφίδρομες αντιδράσεις που περιγράφουν τις αντιδράσεις μεταξύ των CO, NO και του O₂ σε επιφάνεια Pd/Al₂O₃. Για την προσομοίωση της λειτουργίας των καταλυτικών μετατροπών αυτοκινήτου αναπτύχθηκε ένα μονοδιάστατο 1-D μοντέλο σε πλατφόρμα Cantera-Matlab ενσωματώνοντας την επίδραση των εξωτερικών φαινομένων μεταφοράς μάζας αερίου-στερεού, την επίδραση των εξωτερικών φαινομένων μεταφοράς θερμότητας και την επίδραση των φαινομένων διάχυσης στο εσωτερικό του δραστικού υλικού. Η προσέγγιση που ακολουθήθηκε για να ληφθούν υπόψη οι περιορισμοί μεταφοράς μάζας στο εσωτερικό του πορώδους δραστικού υλικού ήταν η εισαγωγή του παράγοντα αποτελεσματικότητας. Οι περιορισμοί μεταφοράς μάζας αερίου-στερεού και οι περιορισμοί μεταφοράς θερμότητας περιγράφηκαν ακολουθώντας την θεωρία λεπτού φιλμ ενσωματώνοντας συντελεστές μεταφοράς μάζας αερίου-στερεού και συντελεστές μεταφοράς θερμότητας όπως αυτοί υπολογίστηκαν με CFD υπολογισμούς με το υπολογιστικό πακέτο Comsol Multiphysics.

Η προσομοίωση εφαρμόστηκε σε μονολιθικές δομές με πυκνότητα κελιών 400 cpsi, υδραυλική διάμετρο κελιού 1.1 mm και πάχος στερεού τοιχώματος 0.17 mm και τα αποτελέσματα ελήφθησαν για αέρια τροφοδοσία με σύσταση CO:1.0% v/v, O₂:0.5% v/v, NO:0.1% v/v και N₂:98.4% v/v.

Με το πακέτο προσομοίωσης υπολογίζονται οι μετατροπές των αντιδρώντων, οι αποδόσεις σε προϊόντα και η θερμοκρασία στην έξοδο του αντιδραστήρα σε όλο το εύρος των μελετώμενων συνθηκών. Επίσης υπολογίζονται τα προφίλ μετατροπών αντιδρώντων, αποδόσεων προϊόντων, θερμοκρασίας, σύστασης αέριας φάσης στην κύρια μάζα του αερίου και στην αέρια φάση πάνω από την καταλυτική επιφάνεια, συντελεστών μεταφοράς μάζας αερίου-στερεού και θερμότητας αλλά και του παράγοντα αποτελεσματικότητας κατά μήκος του καταλυτικού μετατροπέα. Η απόδοση του καταλυτικού μετατροπέα αυτοκινήτων λαμβάνοντας υπόψη τους περιορισμούς μεταφοράς μάζας αερίου-στερεού, περιορισμούς μεταφοράς θερμότητας και τους περιορισμούς στην διάχυση στο εσωτερικό του δραστικού υλικού συγκρίνεται με τα αποτελέσματα που προέκυψαν θεωρώντας ένα μοντέλο PFR για τη διερεύνηση της επίδρασης των επιμέρους περιορισμών στην απόδοση του αντιδραστήρα.

Ευχαριστίες : Η εργασία αυτή πραγματοποιήθηκε με χρηματοδότηση του Ερευνητικού Προγράμματος EC No 686086 με τίτλο 'Development of novel, high Performance hybrid TWV/GPF Automotive after treatment systems by raTlonAL design: substitution of PGMs and Rare earth materials'