



آنالیز CFD مبدل کاتالیستی با نرم‌افزار فلوئنت برای کاهش آلودگی هوا

بهاره بیدار، مریم مزارعی ستوده، سید محمود موسوی*، وحیده غفاریان

گروه مهندسی شیمی دانشکده مهندسی دانشگاه فردوسی مشهد

چکیده

در این تحقیق تأثیر به‌کارگیری مبدل کاتالیستی در خودرو پژو ۴۰۵ برای تبدیل آلاینده‌های هوا مانند گازهای سمی مونواکسیدکربن و اکسیدهای نیتروژن به مواد بی‌ضرر نظیر آب، دی‌اکسیدکربن و... بررسی شده است. به این منظور ابتدا محفظه مونولیت مورد نظر در نرم‌افزار گمبیت شبیه‌سازی شده و شبکه‌بندی مناسب برای آن انتخاب شده است. سپس در نرم‌افزار فلوئنت با تعیین مشخصات دقیق محفظه، مواد، واکنش‌ها، شرایط مرزی و ... شبیه‌سازی مسأله تکمیل و با همگرایی حل آن، غلظت مواد در نقاط مختلف، دما و سایر نتایج به دست آورده شده است. نتایج حاصله نشان می‌دهد دما در طول محفظه افزایش یافته، سرعت در کناره‌های محفظه کم و در میانه‌های محفظه بیشینه است و از طرفی کاهش آلاینده‌ها در خروجی و تبدیل آنها به مواد بی‌ضرر تا حد قابل‌قبولی مطلوب و سازگار با اصول تئوری است. واژه‌های کلیدی: مبدل کاتالیستی، گازهای آلاینده هوا، گمبیت، فلوئنت، CFD

۱ مقدمه

مقدار زیادی از آلودگی‌های محیط‌زیست توسط خودروها تولید می‌شود لذا جهت حفظ سلامتی انسان و محیط‌زیست، امروزه با ایجاد تغییراتی در طراحی موتور و بهینه‌سازی سوخت و مصرف آن تا حدی آلودگی‌ها کاهش داده می‌شود. برای کاهش گازهای آلاینده منتشره از خودروها می‌توان از مبدل‌های کاتالیستی^۱ استفاده نمود. هدف از استفاده از این مبدل‌ها، تبدیل گازهای مضر خودرو به مواد بی‌ضرر است. برخی از گازهای مضر عبارتند از: هیدروکربن‌ها (سوخت نسوخته)، مونواکسیدکربن، اکسیدهای نیتروژن، ترکیبات گوگرددار نظیر دی‌اکسیدگوگرد، نمک‌های سرب، فسفر و سایر فلزات. برای جلوگیری از خروج این گازهای آلاینده محیط‌زیست از موتور، مبدل کاتالیستی در مسیر اگزوز، بین منیفولد و صداخفه‌کن تعبیه می‌شود و یک ترکیب شیمیایی که می‌تواند به عنوان کاتالیزور عمل کند، به‌کارگیری می‌شود. مبدل کاتالیستی شامل قسمت بیرونی فلزی و قسمت داخلی می‌باشد که از پوشش دادن فلزات گرانبهایی نظیر پلاتین، پالادیوم و ... بر روی پایه‌ای سرامیکی یا فلزی به نام مونولیت ساخته شده است.

از جمله تحقیقاتی که در زمینه استفاده از مبدل‌های کاتالیستی برای تبدیل آلاینده‌های هوا به مواد بی‌ضرر انجام شده است، می‌توان به مطالعات گرانجر و همکارانش [۱] اشاره نمود که به بررسی سینتیک

* E-mail: mmousavi@um.ac.ir, Tel: 0511-8815100



واکنش مونواکسیدکربن و اکسیژن و رقابت این واکنش با واکنش مونواکسیدکربن و اکسیدنیترژن بر روی کاتالیست دوفلزی پلاتین و رودیوم بر پایه‌ای از اکسید آلومینیوم در یک راکتور بستر ثابت پرداخته‌اند. لذا در نتیجه ممانعت اکسیدنیترژن از رخداد واکنش نخست، حتی در دماهای بالا نیز اکسیژن صرفنظر از ترکیب کاتالیست و خوراک، در حالت مولکولی باقی می‌ماند. در تحقیق دیگری گرانجر و همکارانش [۲] واکنش احیاء اکسیدنیترژن را به وسیله مونوکسیدکربن در کاتالیست‌های سهرابه^۱ خودرو بررسی کرده‌اند و مطالعه سطوح در این بررسی نشان داد رودیوم تمایل بیشتری به تفکیک اکسیدنیترژن به اتم‌های نیترژن و اکسیژن و دفع مولکول نیترژن از سطح دارد در حالیکه ویلیامز (Williams) و همکارانش [۳] با طیف‌نمایی روی فیلم‌هایی از پلاتین، پالادیوم و رودیوم نشان دادند که رودیوم نسبت به سایر مواد در این واکنش انتخابی‌تر عمل می‌کند. گرانجر و همکارانش [۴] رفتار سنتیکی کاتالیست سهرابه پلاتین-رودیوم را بر پایه اکسید آلومینیوم برای واکنش اکسیدنیترژن و مونواکسیدکربن مورد مطالعه قرار داده و با شبیه‌سازی عددی، رابطه نزدیک بین واکنش‌های شیمیایی و نقل و انتقال فرآیندها در کانال مونولیت را بیشتر آشکار کردند. چترچی (Chatterjee) و همکارانش [۵] با در نظر گرفتن مدل‌های کلی و صرفنظر از واکنش‌های منفرد روی کاتالیست، مدلی برای بررسی چگونگی جذب متفاوت روی کاتالیست رودیوم-پلاتین ارائه کرده‌اند که نتایج به‌دست‌آمده از مدل ارائه شده با مقادیر آزمایشگاهی توافق خوبی را نشان می‌دهد.

در این تحقیق تأثیر به‌کارگیری مبدل کاتالیستی در خودرو پژو ۴۰۵، جهت کاهش آلاینده‌های هوا مورد بررسی قرار گرفته است. به این منظور عملکرد مبدل پس از تعریف اندازه‌ها و هندسه محفظه خودروی مورد نظر در نرم‌افزار گمبیت^۲، با کمک نرم‌افزار فلونتت شبیه‌سازی شده است. نتایج حاصل از این شبیه‌سازی مشتمل بر غلظت مواد در نقاط مختلف محفظه، دما، فشار و سرعت بررسی شده‌اند.

۲ مبدل کاتالیستی سهرابه و مکانیزم واکنش‌های آن

مبدل کاتالیستی سهرابه نقش احیاءکنندگی و اکسیدکنندگی را به صورت توأم دارد. لذا علاوه بر انجام عمل اکسیداسیون بر روی مونواکسیدکربن و هیدروکربن‌های سوخته‌نشده، بر روی ترکیبات نیترژن‌دار^۳ نیز اثر احیاءکنندگی دارد. بنابراین به طور کلی واکنش‌های انجام شده در این مبدل به صورت زیر می‌باشد:



1- Three ways catalyst converter
2- Gambit
3- NO_x



در این تحقیق با در نظر گرفتن هوا، اکسیدنیترژن و همچنین پروپان به عنوان هیدروکربن و از طرفی انتخاب رودیوم، پلاتین و سریم به عنوان کاتالیست، مطابق آنچه اون (Kwon) و همکارانش [۶] در جدول ۱ پیشنهاد کرده‌اند، ۲۴ واکنش در نظر گرفته شده است.

جدول ۱- واکنش‌های به کار گرفته شده [۶]

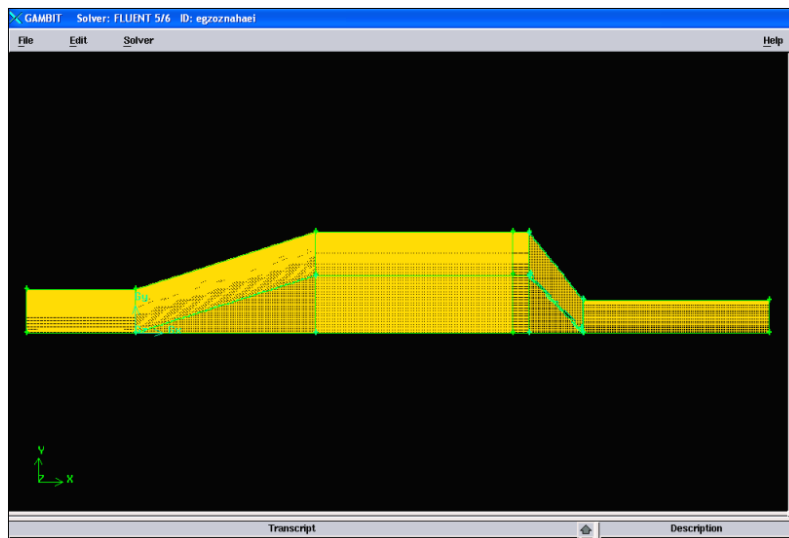
شماره	واکنش	پارامترهای سینتیکی				
			4k	100k	4k	100k
1	$CO + S \leftrightarrow CO.S$	$K_{0,1}$	2.3×10^{-3}	2.3×10^{-3}	ΔH_1	60.1
2	$C_3H_6 + S \leftrightarrow C_3H_6.S$	$K_{0,2}$	1.1×10^{-2}	1.1×10^{-2}	ΔH_2	32.3
3	$H_2 + 2S \leftrightarrow 2H.S$	$K_{0,3}$	6.6×10^{-3}	6.6×10^{-3}	ΔH_3	44.9
4	$O_2 + 2S \leftrightarrow 2O.S$	$K_{0,4}$	9.1×10^{-8}	9.1×10^{-8}	ΔH_4	58.4
5	$NO + S \leftrightarrow NO.S$	$K_{0,5}$	5×10^{-4}	5×10^{-4}	ΔH_5	76
6	$H_2O + S \leftrightarrow H_2O.S$	$K_{0,6}$	4.4×10^{-13}	4.4×10^{-13}	ΔH_6	96.6
7	$NH_3 + S \leftrightarrow NH_3.S$	$K_{0,7}$	7.2×10^{-5}	7.2×10^{-5}	ΔH_7	11.8
8	$N_2O + S \leftrightarrow N_2O.S$	$K_{0,8}$	5.2×10^{-4}	5.2×10^{-4}	ΔH_8	39.9
9	$H_2O.S + S \rightarrow OH.S + H.S$	$k_{0,1}$	3.9×10^{-3}	1.9×10^{-3}	$E_{a,1}$	145.7
10	$H_2O.S + O.S \rightarrow 2OH.S$	$k_{0,2}$	3.6×10^{-2}	1.4×10^{-2}	$E_{a,2}$	141.1
11	$H.S + O.S \rightarrow OH.S + S$	$k_{0,3}$	7.4×10^2	2×10^2	$E_{a,3}$	75.6
12	$CO.S + O.S \rightarrow CO_2 + 2S$	$k_{0,4}$	70	20	$E_{a,4}$	79
13	$C_3H_6.S + 9O.S \rightarrow 3CO_2 + 3H_2O.S + 7S$	$k_{0,5}$	5×10^4	1.0×10^4	$E_{a,5}$	92.8
14	$H.S + OH.S \rightarrow H_2O.S + S$	$k_{0,6}$	1.2×10^3	6.9×10^2	$E_{a,6}$	65.5
15	$CO.S + 2OH.S \rightarrow CO_2 + H_2O.S + 2S$	$k_{0,7}$	0.14	0.14	$E_{a,7}$	43.3
16	$NO.S + S \rightarrow N.S + O.S$	$k_{0,8}$	8.3×10^{-10}	2.2×10^{-10}	$E_{a,8}$	52.9
17	$NO.S + N.S \rightarrow N_2O.S + S$	$k_{0,9}$	4.8×10^6	2.6×10^6	$E_{a,9}$	52.9
18	$NO.S + N.S \rightarrow N_2 + O.S + S$	$k_{0,10}$	4.8×10^5	4×10^5	$E_{a,10}$	67.6
19	$NO.S + H.S \rightarrow N.S + OH.S$	$k_{0,11}$	1.2×10^{-2}	3.2×10^{-3}	$E_{a,11}$	76
20	$N.S + 3H.S \rightarrow NH_3.S + 4S$	$k_{0,12}$	1.3×10^7	9×10^6	$E_{a,12}$	34.4
21	$2NH_3.S + 5O.S \rightarrow 2NO.S + 3H_2O.S + 2S$	$k_{0,13}$	1.7×10^2	7.2×10	$E_{a,13}$	76
22	$2NH_3.S + 3O.S \rightarrow N_2 + 3H_2O.S + 2S$	$k_{0,14}$	5.9×10^3	4.9×10^3	$E_{a,14}$	43.7
23	$2NH_3.S + 2NO.S + O.S \rightarrow 2N_2 + 3H_2O.S + 2S$	$k_{0,15}$	5.1×10	4.1×10	$E_{a,15}$	36.5
24	$N_2O.S \rightarrow N_2 + O.S$	$k_{0,16}$	0.46	0.32	$E_{a,16}$	115.9

$$K_{0,i} [m^3.mol^{-1}] \quad k_{0,i} [mol.m^{-3}.s^{-1}] \quad \Delta H_i [kJ.mol^{-1}] \quad \text{and} \quad E_{a,i} [kJ.mol^{-1}]$$



۳- شبیه‌سازی

در گام نخست برای شبیه‌سازی مسئله نیاز به تولید شکل و شبکه‌بندی آن در نرم‌افزارهای پیش‌پردازنده می‌باشد. در نتیجه هندسه سه بعدی از محفظه مبدل در نرم‌افزار گمبیت مطابق شکل ۱ تولید شده‌است. البته با توجه به تقارن شکل، از ۱/۴ حجم آن برای مدل‌سازی استفاده شده‌است. محفظه مشتمل بر یک ورودی و یک خروجی است که قسمت‌های بالایی دیواره و مکان‌های میانی فرضی است.



شکل ۱- شکل مش زده شده از مبدل کاتالیستی در نرم‌افزار گمبیت

در مرحله بعد فایل آماده شده در نرم‌افزار فلوئنت خوانده شده، ساختار شبکه چک شده و شبکه‌بندی آن یکنواخت می‌شود. برای حل مسئله در فضای سه بعدی، حل کننده مجزا^۱ انتخاب شده‌است. به منظور تعیین اثرات حرارتی و دمایی شبکه، محاسبات انرژی نیز فعال می‌گردد. برای تعیین مدل آشفتگی در قسمت مدل لزوج^۲، مدل k-epsilon انتخاب می‌شود. در مرحله بعد مواد و واکنش‌های فعال در مبدل وارد می‌شود سپس شرایط عملیاتی در فشار اتمسفریک و شتاب ثقل وارد می‌شود. برای تعیین شرایط مرزی، مشخصات خوراک ورودی و محصول خروجی از مبدل به ترتیب مطابق ردیف اول و دوم جدول ۲ وارد شده‌است. PM* در این جدول مبین مقدار جرمی ذرات جامد می‌باشد.

جدول ۲- مقادیر جرمی ذرات در شرایط مرزی [۷]

H ₂ O	NO _x	CO	HC	PM*	SO _x	CO ₂	سوخت
۱۴۱/۷۵	۳/۵	۱۵/۰	۱/۹	۰/۰۳	۰/۰۵	۳۰۸	بنزین
۱۴۶/۸۱	۰/۱۶	۱/۹	۰/۱۹	۰/۰۲	۰/۰۵	۳۱۹	بنزین+کاتالیزور

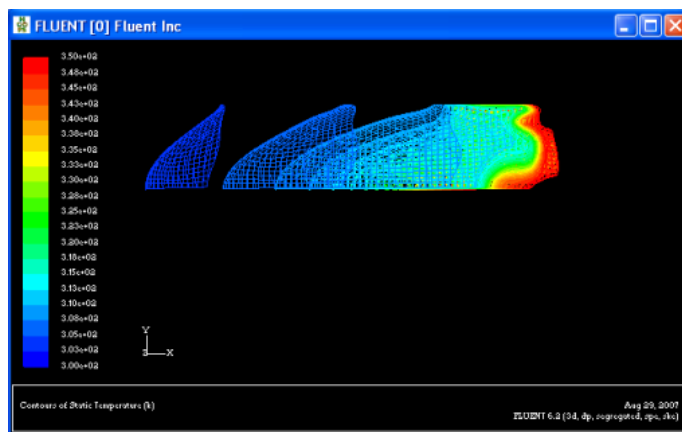
1- Segregated
2- Viscous model



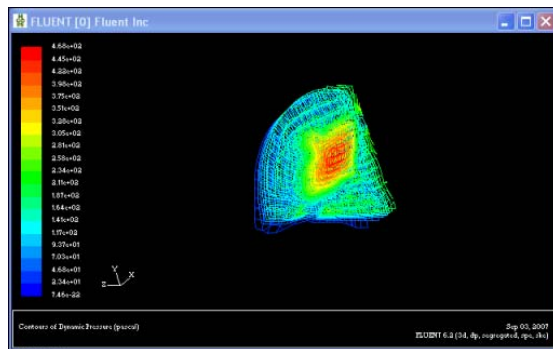
با در نظر گرفتن ضخامت 2×10^{-3} m برای دیواره آلومینیومی و صرفنظر از اتلاف حرارتی، می‌توان مسأله را حل نمود.

۴- نتایج و بحث

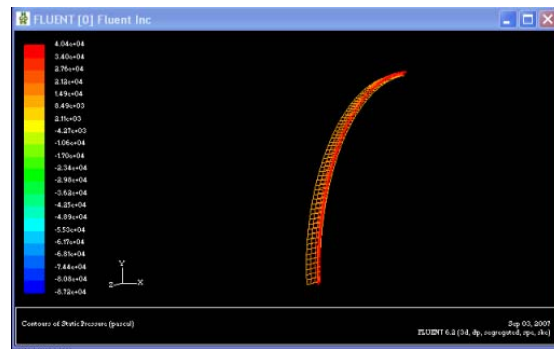
پس از ۱۰۰ مرحله تکرار، مسئله همگرا شده و دیگرام‌های دما، فشار، سرعت و غلظت ذرات به‌دست‌آمده‌اند که در شکل‌های ۲ تا ۸ آورده شده‌اند. در شکل ۲ افزایش دما در مبدل نشان داده شده‌است و با توجه به آن که واکنش‌های شیمیایی گرمازا می‌باشند، این شکل با تئوری سازگار است.



شکل ۲- پروفایل دما در طول محفظه



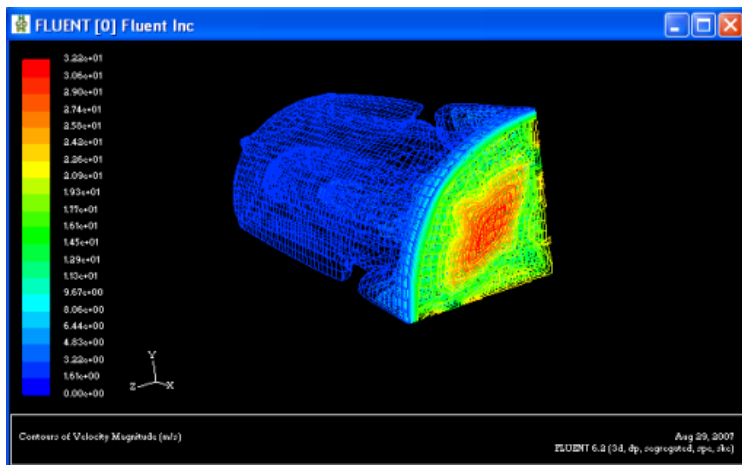
ب



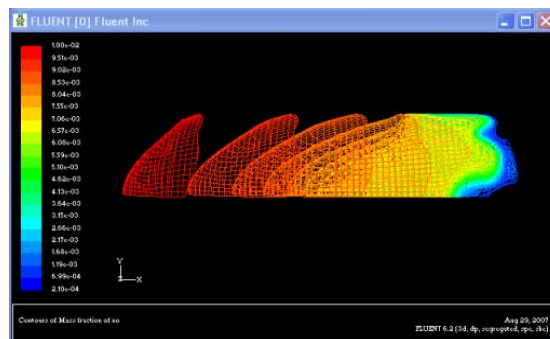
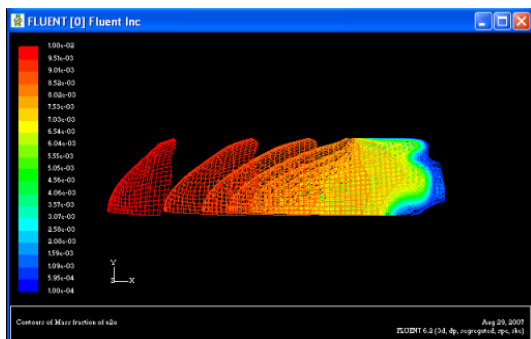
الف

شکل ۳- الف- پروفایل فشار استاتیکی ، ب- پروفایل فشار دینامیکی در طول محفظه

در شکل ۴ مشاهده می‌شود سرعت بیشینه به دلیل آشفتگی و جریان برگشتی در میانه‌های محفظه رخ می‌دهد. در شکل ۵ نتایج مربوط به پروفایل‌های کسر جرمی گروه اکسیدهای نیتروژن مشتمل بر NO، NO₂ و N₂O ارائه شده‌است. مطابق شکل‌های به‌دست‌آمده، ترکیبات فوق در طی مسیر عبور، با توجه به واکنش‌های جدول ۱ روی سطح کاتالیست احیاء شده و لذا در انتهای محفظه به کمترین مقدار خود می‌رسند.

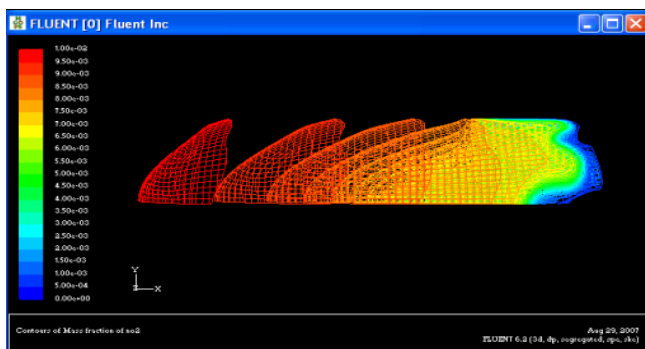


شکل ۴- پروفایل سرعت در طول محفظه



ب

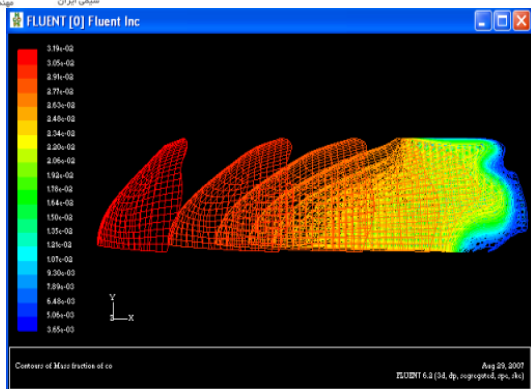
الف



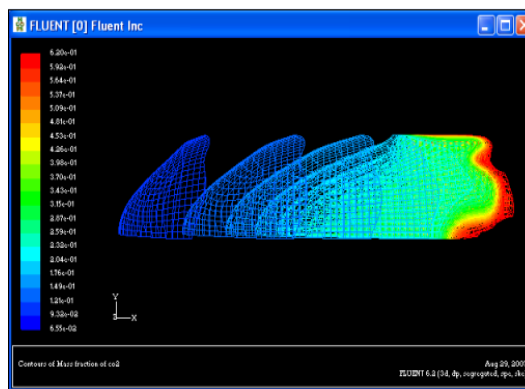
ج

شکل ۵- الف- پروفایل کسر جرمی NO، ب- پروفایل کسر جرمی N₂O و ج- پروفایل کسر جرمی NO₂ در طول محفظه

در شکل ۶ پروفایل‌های کسرهای جرمی دی‌اکسیدکربن و مونواکسیدکربن نشان داده شده است. نتایج حاکی از افزایش میزان دی‌اکسیدکربن می‌باشد. با توجه به اینکه دی‌اکسیدکربن از اکسیداسیون مونواکسیدکربن حاصل می‌شود، میزان این ماده مطابق شکل ۶-ب باید کاهش یابد که با توجه به آلاینده بودن مونواکسیدکربن، این کاهش مطلوب و با داده‌های تئوری نیز سازگار می‌باشد.



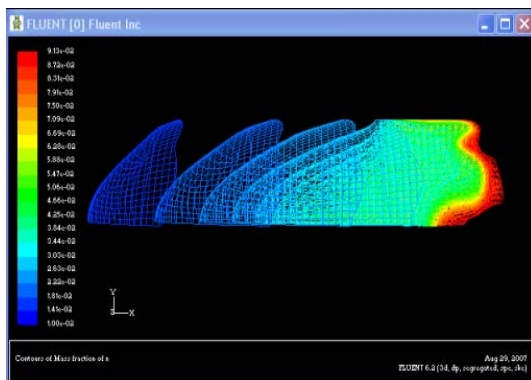
ب



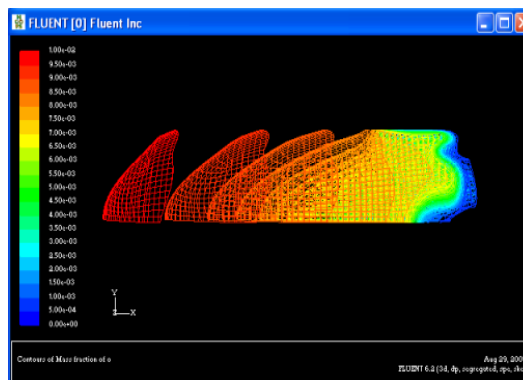
الف

شکل ۶-الف- پروفایل کسر جرمی CO₂ ، ب- پروفایل کسر جرمی CO در طول محفظه

در شکل ۷ پروفایل‌های کسر جرمی اتم اکسیژن و نیتروژن نشان داده شده‌است. مطابق شکل ۷-الف اکسیژن در طی مسیر مصرف می‌شود زیرا اکسیژن در واکنش‌های اکسیداسیون شرکت کرده و در حضور کاتالیست مطابق جدول ۱ مصرف می‌شود. اما با توجه به واکنش‌های احیاء، اکسیدهای نیتروژن به نیتروژن تبدیل شده و لذا میزان این ماده در خروجی افزایش می‌یابد.



ب



الف

شکل ۷-الف- پروفایل کسر جرمی O ، ب- پروفایل کسر جرمی N در طول محفظه

در شکل ۸ کسر جرمی آب و پروپان نشان داده شده‌است. با توجه به انجام واکنش‌ها و تبدیل پروپان به دی‌اکسیدکربن و آب، کسر جرمی آب در خروجی افزایش و کسر جرمی پروپان کاهش می‌یابد.

۵- نتیجه‌گیری

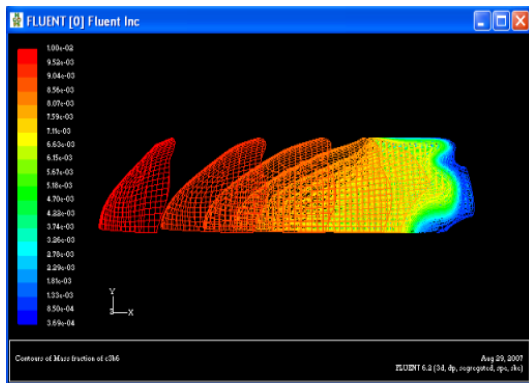
نتایج به دست آمده از نرم‌افزار حاکی از کارایی مناسب مونولیت به کارگرفته شده در تبدیل و کاهش گازهای آلاینده می‌باشد. بر اساس غلظت‌های مواد در خروجی مشخص می‌شود که میزان مواد آلاینده تا حد مطلوب کاهش یافته و به ترکیبات بی‌ضرری نظیر دی‌اکسیدکربن، نیتروژن و آب تبدیل شده است. لذا می‌توان استفاده از مبدل‌های کاتالیستی را در پژو ۴۰۵ جهت تأمین استانداردهای محیط‌زیست بسیار مفید دانست.



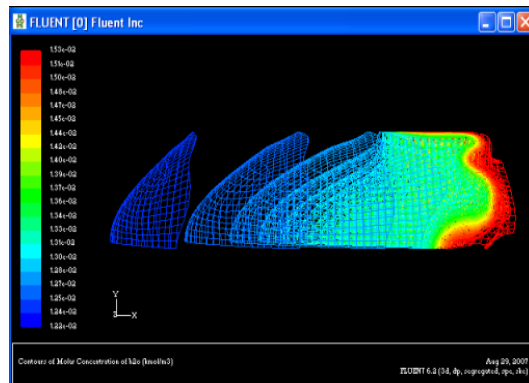
پروفیل دمای به دست آمده نشان می دهد دما در طول مونولیت در حال افزایش است که روندی قابل قبول است زیرا واکنش های انجام شده بر روی سطح کاتالیست ها گرمازا می باشند. از روی پروفیل مربوط به سرعت می توان اینگونه نتیجه گرفت که در کناره های محفظه، میزان سرعت کمتر یا به عبارتی جریان به حالت آرام نزدیک تر است اما در میانه های محفظه بدلیل آشفته گی بیشتر و وجود جریان های برگشتی، میزان سرعت بیشتر است.

بررسی اثر کاتالیست های فلزی پلاتین، رودیوم و سریم در مونولیت به کار گرفته شده، نشان می دهد این مواد در سرعت بخشیدن به واکنش های اکسیداسیون و احیا و همچنین گزینش پذیری در برابر واکنش های مختلف نقش مؤثری ایفا می کنند.

با توجه به تمام نتایج به دست آمده می توان شبیه سازی انجام شده با نرم افزار و همچنین فرضیات و اطلاعات اولیه به کار برده شده را تا حد قابل قبولی با اصول تئوری و پیش بینی های انجام شده سازگار دانست.



ب



الف

شکل ۸- الف- پروفایل کسر جرمی H_2O ، ب- پروفایل کسر جرمی C_3H_6 در طول محفظه

مراجع

- 1- P. Granger, J. Lecomte, L. Leclercq, G. Leclercq, An attempt at modeling the activity of Pt- Ph/Al₂ O₃ three-way catalysts in the CO+NO reaction, J. Applied Catalysis A: General. 208 (2001) 369.
- 2- P. Granger, C. Dujardin, J. F. Paul, G. Leclercq, An overview of kinetic and spectroscopic investigations of three-way catalysts: mechanistic aspects of the CO+NO and CO+N₂O reactions, J. Molecular Catalysis A: Chemical. 228 (2005) 241.
- 3- C. T. Williams, A. A. Tolia, H. Y. H. Chan, C. G. Takoudis, M. J. Weaver, Surface-Enhanced Raman Spectroscopy as an in situ real-time probe of catalytic mechanisms at high gas pressure: The CO-NO Reaction on Platinum and Palladium, J. Catalysis. 163 (1996) 63.
- 4- P. Granger, J. Lecomte, L. Leclercq, G. Leclercq, Kinetics of the CO + O₂ reaction over three-way Pt-Rh catalysts, J. Applied Catalysis A: General. 218 (2001) 257.
- 5- D. Chatterjee, O. Deutschmann, J. Warnatz, Detailed surface reaction mechanism in a three-way catalyst, J. Faraday Discuss. 119 (2001) 371.
- 6- H. Kwon, J. H. Baik, Y. T. Kwon, I. S. Nam, S. H. Oh, Detailed reaction kinetics over commercial three-way catalysts, J. Chemical Eng. Sci. 62 (2007) 5042.

۷. حائری یزدی، م. ر.، سعدالدین، س.، مجموعه مقالات کنفرانس خودرو و محیط زیست، آذرماه ۱۳۷۴.