



بررسی عملکرد واکنشگر شیمیایی سه منظوره در موتوری ۱,۷ لیتری پرخوران در حالت استفاده از سوخت ترکیبی گاز طبیعی و بنزین

عباس راعی تبار^۱، علی اصغر حمیدی^{۲*}، حسین قدمیان^۳

^۱ دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات تهران، دانشکده مهندسی انرژی و محیط زیست، تهران، ایران raeitabar@riau.ac.ir

^۲ دانشگاه تهران، دانشکده شیمی، ایران aahamidi@ut.ac.ir

^۳ پژوهشکده مواد و انرژی، کرج، ایران h.ghadamian@merc.ac.ir

* نویسنده مسئول

اطلاعات مقاله

تاریخچه مقاله:

دریافت: ۷ خرداد ۱۳۹۵

پذیرش: ۱۳ دی ۱۳۹۵

کلیدواژه‌ها:

واکنشگر سه منظوره

موتور پرخوران

ترکیب سوخت بنزین و گاز طبیعی

آلاینده‌ها

چکیده

در این مقاله عملکرد موتوری اشتعال جرقه‌ای پرخوران با ترکیب سوخت های گاز و بنزین ارائه می شود و عملکرد واکنشگر شیمیایی سه منظوره در آن بمنظور بررسی مقدار انتشار آلاینده ها و دست یابی به بهترین بازده تبدیل بررسی شده است. استفاده از سوخت گاز طبیعی به عنوان یکی از سوخت های جایگزین با عدد اکتان بزرگ به همراه سوخت بنزین سبب کاهش آلاینده ها و ایجاد تنوع در منابع سوخت مصرفی خودروها می شود و بعنوان ایده ای جدید مورد توجه خودروسازان دنیا واقع شده است. با توجه به اینکه پاشش گاز موجب کاهش بازده تنفسی می شود و بر روی بیشینه گشتاور تأثیر می گذارد، استفاده از موتورهای اشتعال جرقه ای مجهز به سامانه پرخوران، مورد توجه طراحان موتور است. مصرف سوخت کمتر، توان و بازده قویتر نسبت به موتورهای تنفس طبیعی با حجم یکسان، از مزایای یک موتور پرخوران است. انجام آزمون موتوری نشان می دهد در حدود نسبت اختلاط جرمی ۳۰ درصد دو سوخت در سرعت دورانی ۳۰۰۰ دور در دقیقه (د.د.د)، مصرف سوخت و پایداری احتراق در شرایط پهنه تری قرار می گیرد. ضمن آنکه بیشینه توان موتور نیز در این نسبت اختلاط حاصل می شود. استفاده از واکنشگرهای شیمیایی سه منظوره یکی از مؤثرترین روش های مهار آلاینده ها برای موتورهای اشتعال جرقه ای است. بازده تبدیل گازهای آلاینده خروجی HC، CO و NOx بعنوان اصلی ترین موضوع در بررسی عملکرد و کارایی واکنشگر است که در این تحقیق بررسی شده است. نتایج نشان می دهند در دمای محیط واکنشگر در حدود ثانیه ۵۰ به بیشینه دمایی خود می رسد و پس از آن در حد ثابتی باقی می ماند که در این حالت آلاینده های NOx و CO پس از گذران زمان گرمایش و راه اندازی واکنشگر نرخ تبدیل آلاینده های شروع می شود و با نرخ شدید به بازده تبدیل ۹۵٪ می رسد. شروع واکنش برای آلاینده HC با سوخت گاز طبیعی دیرتر صورت می پذیرد و در واقع واکنشگر به دمای گرمتری برای شروع واکنش نیاز دارد.



تمامی حقوق برای انجمن علمی موتور ایران محفوظ است.

۱- مقدمه

آلودگی محیط زیست یکی از بزرگترین مشکلاتی است که جوامع بشری در قرن اخیر با آن مواجه اند. امروزه در جوامع صنعتی و کلان شهرها موتور خودروها منبع اصلی آلودگی شهری محسوب می‌شوند. نزدیک به یک سوم آلودگی هوای شهرها ناشی از پیمایش خودروهاست. اهمیت خسارت‌های بوجود آمده از آلودگی‌های خودرو اولین بار بطور جدی حدود ۵۰ سال پیش فهمیده شد و پس از آن قوانین سخت گیرانه‌ای برای تنظیم و محدود ساختن تولید آلودگی‌های مضر خودروها وضع شدند [۱].

موتورهای اشتعال جرقه‌ای بنزینی، معمولی‌ترین نوع موتورهای احتراق داخلی محسوب می‌شوند. از طرفی دیگر موتورهای اشتعال جرقه‌ای مجهز به سامانه پرخوران، بدلیل کوچک سازی و توانایی تولید مورد توجه طراحان موتور است. مصرف سوخت کمتر، توان و بازده زیادتر نسبت به موتورهای تنفس طبیعی با حجم یکسان، از مزایای یک موتور پرخوران است. همچنین محدودیت ارتفاع از سطح دریا که در موتور تنفس طبیعی منجر به افت توان و افزایش مصرف سوخت می‌شود، در موتور پرخورانی شده وجود ندارد؛ بلکه بالعکس، کارایی توربین پرخوران در ارتفاع زیاد، به خاطر تفاوت فشار بیشتر بین فشار ثابت بالادست توربین و فشار کمتر محیط در خروجی، بهبود می‌یابد.

استفاده از ترکیب همزمان سوخت گاز طبیعی فشرده^۱ و بنزین در موتورهای پرخوران بسیار سودمند است چرا که به دلیل افزایش عدد اکتان سوخت، باعث بهبود آلاینده‌های خروجی از موتور و همچنین افزایش مرز کوبش می‌شود که یکی از مشکلات ریشه‌ای موتورهای پرخوران بنزینی است.

از جمله راهکارهای مهم دیگر برای جلوگیری از احتمال وقوع کوبش در بارهای قوی در طراحی یک موتور پرخوران؛ بهینه‌سازی نسبت تراکم، انتخاب مناسب شکل محفظه احتراق و تنظیم دقیق سامانه پرخوران است. بدیهی است استفاده از سوخت با عدد اکتان مناسب هم می‌تواند در جابجایی مرز وقوع کوبش در موتور پرخوران نقش مؤثری داشته باشد ولی افزایش عدد اکتان معمولاً از طریق افزودنی‌هایی است که موجب آلودگی و انتشار مواد مضر می‌شود که تهدیدی بر سلامت انسان‌هاست. [۲].

در حالت استفاده از سوخت گاز، تبدیل آلودگی‌ها بویژه آلاینده‌های THC^۲ مشکل خواهد بود زیرا:

- مقدار مولکول‌های متان در سوخت گاز بیشتر است.
- مولکول متان از لحاظ شیمیایی نسبت به مولکول C_8H_{18} (بنزین) پایدارتر است بنابراین تبدیل آن در واکنشگر دشوارتر است (گرمای دود بیشتری مورد نیاز است)

- محدوده بازه عملکردی لامبدا برای تبدیل گاز نسبت به سوخت بنزین بسته تر است.

- واکنشگرهای کارکرده دارای دمای شروع به واکنش گرمتری اند. گازهای خروجی از موتورهای شامل سه نوع آلاینده اصلی یعنی هیدروکربن‌های نسوخته، مونو اکسیدکربن و اکسیدهای نیتروژن (بیشتر شامل اکسید نیتروژن) است. البته در بعضی استانداردها متان به عنوان آلاینده در نظر گرفته نمی‌شود، چراکه متان تأثیر سوء بر بدن انسان ندارد و فقط جزء گازهای گلخانه‌ای است (مشابه CO_2) که اثر آن گرم شدن کره زمین است. در چرخه‌های اروپایی (و ایران) کل هیدروکربن‌ها به عنوان گازهای آلاینده محسوب می‌شوند. همچنین سایر اجزاء عبارتند از: آب، هیدروژن، نیتروژن، اکسیژن، دی‌اکسید کربن، اکسیدهای گوگرد و غیره. یکی از مؤثرترین روش‌ها برای کاهش آلودگی خروجی از موتورها، استفاده از روش‌های پس پالایش است. در این روش‌ها آلاینده تولید شده در موتور با استفاده از روش‌های شیمیایی (مبدل‌های شیمیایی) یا فیزیکی (صافی‌ها) به مواد دیگر که مضر نیستند تبدیل می‌شوند. در این میان، واکنشگرهای شیمیایی سه منظوره^۳ از دهه ۷۰ میلادی تا به امروز به طور گسترده مورد استفاده قرار گرفته‌اند [۳]. ژانگ در سال ۲۰۰۵ تحقیقی برای مطالعه تجربی و عددی رفتار واکنشگر شیمیایی تحت شرایط عملکردی مختلف موتور انجام داد. در این تحقیق تأثیر شرایط عملکردی مختلف نظیر نسبت هوا/سوخت‌های مختلف بر روی متغیرهای واکنشگر مانند ظرفیت ذخیره سازی اکسیژن بررسی گردید و الگویی نیز برای این منظور توسعه داده شد. نتایج نشان داد که ظرفیت ذخیره سازی اکسیژن عدد ثابتی نیست و به مقدار اکسیژن موجود در دود بستگی دارد [۴]. براند و همکاران تحقیقی برای شبیه سازی دینامیکی واکنشگر سه منظوره بمنظور تنظیم آلودگی آلاینده‌های خروجی موتور اشتعال جرقه‌ای انجام دادند. در این تحقیق نشان داده شد که بازده تبدیل یک واکنشگر به نسبت جرمی هوا به سوخت ورودی به واکنشگر بستگی دارد و طرحی مهاری برای پیش بینی مقدار آلاینده‌های خروجی از واکنشگر ارائه گردید [۵]. براون و همکاران در سال ۲۰۰۲ تحقیقی برای شبیه سازی سه بعدی رفتار گذرای یک واکنشگر شیمیایی سه منظوره ارائه دادند که در آن با استفاده از یک برنامه CFD به نام DETCHEM رفتار واکنشگر به منظور تخمین آلاینده‌های خروجی از آن در شرایط ورودی‌های متغیر شبیه سازی گردید [۶]. سلامیه و همکاران [۷] نیز با استفاده از یک الگوی یک بعدی اثر تغییر اعداد Sh , Nu را بررسی کردند. او این اعداد را بین ۳٫۵ تا ۴٫۵ تغییر داد و تغییر محسوسی در عملکرد مبدل مشاهده نکرد. کاستا و همکاران [۸] اعداد Sh , Nu را بین ۱ تا ۱۰ برابر حالت جریان لایه‌ای تغییر دادند و نتایج نشان داد که در حالت‌های عملکردی مختلف موتور اثر این افزایش متفاوت است. در

³ Three -Way Catalytic Converter

¹ CNG (Compressed Natural Gas)

² Total Hydro Carbons

۳. فلز واکنشگر^۶ از جنس Rh, Pd, Pt

جدول ۱: واکنش‌های اصلی در واکنشگر [۷]

نوع واکنش	معادله شیمیایی
اکسایش	$2CO + O_2 \rightarrow 2CO_2$
	$HC + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$
	$2CO + 2N \rightarrow 2CO_2 + N_2$
کاهش	$HC + NO \rightarrow CO_2 + H_2O + N_2$
	$2H_2 + 2NO \rightarrow 2H_2O + N_2$

موتور مورد استفاده در این تحقیق یک موتور ۱٫۷ لیتری مجهز به پرخوران با توان اسمی 110 kw در سرعت دورانی ۵۵۰۰ د.د.د. و گشتاور بیشینه 215 N.m در سرعت دورانی ۲۲۰۰-۴۸۰۰ د.د.د. و منطبق با استاندارد آلایندگی اروپا ۴ است. مشخصات واکنشگر در جدول ۲ نشان داده شده است. در این واکنشگر مقدار تمرکز خانه‌های واکنشگر در سطح ۶۰۰ و بارگذاری نیز ۳۰ گرم بر هر فوت مکعب در نظر گرفته شده است. علت انتخاب این نوع بارگذاری نیز توجه به معیارهای استاندارد، هزینه تولید و شرایط زینه بندی^۷ راحت تر موتور در نظر گرفته شده است.

جدول ۲: مشخصات واکنشگر

چگالی خانه ها	۶۰۰ single brick
ضخامت دیواره	۴
بارگذاری (g/ft ³)	۳۰
PM ratio (Pt:Pd:Rh)	۰:۵:۱
قطر (میلیمتر)	۱۱۸,۴۱ ROUND
طول (میلیمتر)	۱۲۷ کلی

۳-۳ شبیه سازی واکنشگر

۱-۳ هندسه

تصویر الگوی واکنشگر، در شکل ۲ نشان داده شده است. بمنظور تحلیل، قسمت های ورودی و خروجی و همچنین پوسته^۵ واکنشگر به همراه هسته داخلی الگوسازی شده است.

۲-۳ شبکه بندی

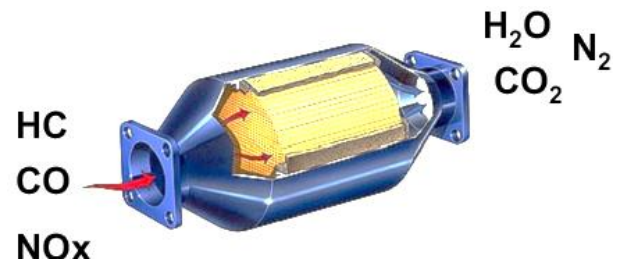
بمنظور انجام محاسبات شبیه سازی شبکه بندی واکنشگر با استفاده از نرم افزار ICEM CFD و با شبکه‌های مکعبی منظم صورت گرفت. (شکل ۳)

بعضی از حالت‌ها اثر مثبت و در برخی اثر منفی دارد. یعنی در برخی از نقاط عملکردی، بازده مبدل افزایش و در برخی دیگر کاهش یافت. او این اثر متفاوت را به دلیل اثر متفاوت Sh, Nu دانست چرا که افزایش عدد Nu باعث کاهش نسبی دمای سطح می‌شود و افزایش عدد Sh باعث افزایش بازده تبدیل ولی او نیز به طور کلی اثر Sh را غالب دانست.

در تحقیق حاضر پس از دستیابی به نقطه ای بهینه در ترکیب سوخت گاز و بنزین در یک موتور پرخوران، واکنشگر این موتور در نرم افزار FIRE^۱ شبیه سازی گردید و نمودارهای بازده تبدیل و تغییرات دما و فشار سیال درون آن در شرایط جدید موتور بررسی شد و در نهایت وضعیت جدید موتور از نقطه نظر قابلیت برآورده نمودن نیازمندی‌های استاندارد یورو ۴ بحث شد.

۲- واکنشگر شیمیایی سه منظوره

واکنشگرهای سه منظوره در سطح جامد باعث پایین آوردن انرژی فعالسازی^۲ و واکنش سریع گونه‌ها در دمای معمول اگزوز (۶۰۰ °C - ۳۰۰) می‌شوند [۹]. در حقیقت می‌توان واکنشگر را یک مبدل شیمیایی پنداشت که در آن واکنش‌های جذبی ناهمگن صورت می‌پذیرد. دلیل این نامگذاری توانایی این مبدل‌ها در کاهش همزمان سه آلایندگی CO, HC و NOx است. (شکل ۱)



شکل ۱: عملکرد واکنشگر سه منظوره در تبدیل آلایندگی‌ها

با توجه به طبیعت متفاوت سه نوع آلایندگی اصلی، واکنشگر دود باید به‌طور همزمان فرآیندهای اکسایش و کاهش را انجام دهد. این فرآیندها توسط تعداد بسیار زیادی واکنش‌های شیمیایی که در واکنشگر روی می‌دهد انجام می‌شوند. بعضی از واکنش‌های اصلی در جدول ۱ نشان داده شده است [۱۰].

واکنشگر شیمیایی شامل قسمت‌های مختلفی است که عبارتند از:

۱. پایه^۳ از جنس سفال^۴ یا فلز

۲. پوشش^۵ از جنس ZrO₂, CeO₂, Al₂O₃

⁵ Wash Coat

⁶ Catalyst Metal

⁷ Calibration

¹ FIRE is a registered trademark of AVL LIST FIRE

² Activation Energy

³ Substrate

⁴ Ceramic

دورانی مقدار گشتاور و توان و خروجی، شار مصرف سوخت گاز و بنزین، آلاینده ها، فشار محفظه احتراق، دما و فشار در نقاط مختلف ورودی و خروجی موتور، شار آب خنک کاری و متغیرهای مهم از رایانه موتور اندازه گیری شد [۱۳].

برای بررسی اثر ترکیب گاز طبیعی و بنزین در تمامی آزمونها، زمان پاشش هر یک از سوخت های گاز طبیعی و بنزین روی عدد مقدار بهینه خود در حالت تک سوخته تنظیم شده است. $BSFC^1$ تصحیح شده در هر یک از حالت های ترکیب گاز طبیعی و بنزین از رابطه زیر محاسبه می شود [۱۳]:

$$BSFC \left(\frac{g}{kW \cdot h} \right) = 1000 \frac{\dot{m}_{Gasoline} + \dot{m}_{CNG} \frac{LHV_{CNG}}{LHV_{Gasoline}}}{Engine Power (Kw)} \quad (1)$$

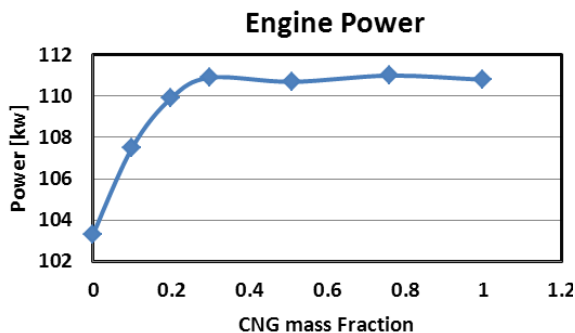
رقت (λ - لامبدا) و غنا (ϕ - نسبت هم ارزی) دو کمیت تعریف شده برای بیان نسبت سوخت به هوا هستند که با معادله های (۲-۳) بیان می شوند.

$$\lambda = \frac{AF_{actual}}{AF_{stoichiometric}} \quad (2)$$

$$\phi = \frac{1}{\lambda} \quad (3)$$

در این رابطه، شار جرمی گاز طبیعی با ضرب در نسبت ارزش حرارتی گاز طبیعی و بنزین تصحیح شده است. از شار سوخت مصرفی و نسبت هوا به سوخت اندازه گیری شده برای محاسبه شار هوای ورودی استفاده شده است. آزمون ها در سرعت ۵۰۰۰ د.د.د. و تمام بار انجام شده است. توان خروجی موتور در تمامی آزمونها برابر ۱۰۳ کیلووات یعنی بیشینه توان قابل دستیابی در حالت بنزینی است. انتهای زمان پاشش هر یک از سوخت های گاز طبیعی و بنزین نیز روی مقدار بهینه خود در حالت تک سوخته تنظیم شده است.

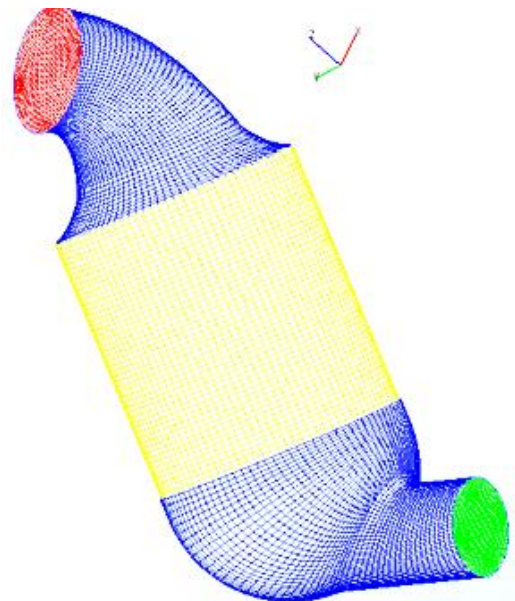
در شکل ۴ نمودار تغییرات توان موتور بر حسب درصد های مختلف ترکیب دو سوخت نشان داده شده است. نمودار نشان می دهد در اختلاط ۳۰٪ توان مطلوب موتور حاصل می شود.



شکل ۴: تغییر توان بر حسب درصد جرمی اختلاط دو سوخت



شکل ۲: الگوی واکنشگر سه منظوره در موتور TC

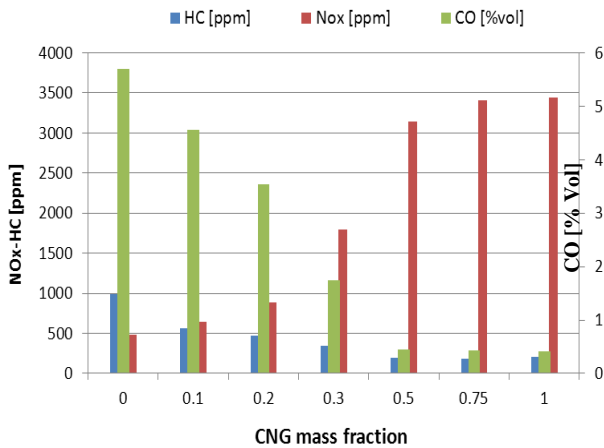


شکل ۳: شبکه بندی واکنشگر سه منظوره موتور TC

۳-۳ شرایط مرزی

شرایط مرزی برای شبیه سازی از نتایج بدست آمده از آزمون موتور با درصد های مختلف اختلاط سوخت گاز طبیعی CNG و بنزین که از اهداف این تحقیق است حاصل آمد. در این آزمون یک موتور ملی احتراق جرقه ای پرخوران در حالت تمام بار و در سرعت های دورانی مختلف روی دینامومتر آزمون موتور از مرکز تحقیقات موتور ایران خودرو مورد آزمون واقع شد. با تغییر کسر جرمی گاز طبیعی (نسبت شار جرمی گاز به شار جرمی مجموع گاز طبیعی و بنزین) در حالت های ۰، ۱۰، ۲۰، ۳۰، ۵۰، ۷۵ و ۱۰۰ درصد و با ثابت نگه داشتن دمای هوای ورودی، دمای آب موتور، دمای گاز های خروجی و گشتاور در هر سرعت

¹ Brake Specific Fuel Consumption



شکل ۵: تغییر مقدار آلاینده ها با درصد تغییرات کسر جرمی گاز

برای حل معادلات تعادل تکانه و پیوستگی در قسمت ورودی واکنشگر از شار جرمی و در صفحه خروجی واکنشگر از فشار بعنوان شرط مرزی استفاده گردید. همچنین برای حل معادلات تعادلی انرژی بقای ذرات وارد نمودن دمای ورودی به واکنشگر و همچنین درصد جرمی ذرات ورودی به شبیه سازی لازم است که از نتایج آزمون این مقادیر استخراج و به شبیه سازی داده شد. در جدول ۳، نتایج اندازه گیری نرخ حجمی ذرات بعنوان شرایط مرزی نشان داده شده است.

جدول ۳: نرخ حجمی ذرات حاصل از آزمون در سرعت ۳۰۰۰ د.د.د.

NOx	CO ₂	HC	CODH	Splitting
۴۸۶,۷۶	۱۱,۶	۹۹۴,۷۷	۵,۷	۰
۶۴۷,۶۱	۱۱,۸۹	۵۶۲,۱۸	۴,۵۶	۰,۱
۸۸۶,۷	۱۲,۱۶	۴۶۵,۶۴	۳,۵۴	۰,۲
۱۷۹۲,۹۱	۱۲,۹۶	۳۴۹,۸۱	۱,۷۵	۰,۳
۳۱۴۰,۸۸	۱۲,۹۹	۱۹۵,۳۲	۰,۴۵	۰,۵
۳۴۰۴,۹۶	۱۲,۰۸	۱۸۰,۹۹	۰,۴۳	۰,۷۵
۳۴۴۶,۹۹	۱۱,۱۸	۲۰۱,۱۵	۰,۴۲	۱

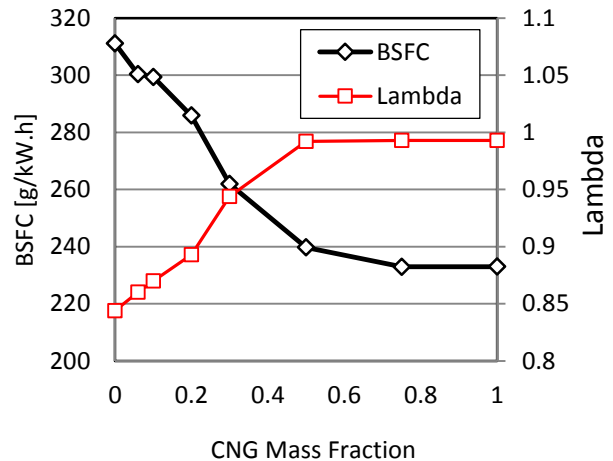
۴- فرضیه‌ها

در این قسمت معادلات و فرضیات حاکم در این شبیه سازی ارائه می‌شود.

۱-۴- شبکه‌های واکنشگر لانه زنبوری^۱

یک واکنشگر شیمیایی لانه زنبوری از هزاران شبکه عبور سیال تشکیل شده است که جریان گاز از میان آنها عبور می‌کند و واکنش‌های شیمیایی روی می‌دهد. این واکنشها در سطوح واکنشگر که پوشش قرار دارد روی می‌دهد. در شکل ۷ جزئیات یک شبکه نشان داده شده است [۱۴].

در شکل ۵ نمودار تغییرات مصرف ویژه سوخت موتوری و نسبت هوا به سوخت در ۳۰۰۰ د.د.د. نشان داده شده است. مطابق شکل با افزودن گاز طبیعی به بنزین و افزایش مقاومت در برابر کوبش، امکان پیشرسی بیشتر زمان جرقه‌زنی فراهم می‌شود و این امر منجر به کاهش دمای آگروز و در نتیجه ایجاد امکان کاهش غنای نسبت هوا به سوخت و در نتیجه کاهش مصرف سوخت می‌شود. پیشرسی زمان جرقه‌زنی و کاهش غنای سوخت، منجر به افزایش بازده احتراق و کاهش بازده تنفسی مورد نیاز برای رسیدن به توان اسمی می‌شود.



شکل ۶: تغییر نسبت هوا به سوخت و مصرف ویژه موتوری با درصد تغییرات کسر جرمی گاز

نتایج اندازه گیری آلاینده‌ها نیز در شکل ۶ نشان داده شده است. با افزودن درصد گاز طبیعی آلاینده‌های خام HC و CO بدلیل وجود درصد کمتر کربن در گاز طبیعی نسبت به بنزین، کاهش غنای سوخت و همچنین احتراق پایدارتر کاهش چشمگیری دارند اما آلاینده NOx تا کسر جرمی ۵۰ درصد گاز طبیعی به آرامی رشد کرده و پس از آن به سرعت افزایش می‌یابد. دلیل افزایش آلاینده NOx افزایش بیشینه دمای محفظه احتراق به دلیل پیشرسی بیشتر زمان جرقه‌زنی بوده است. در اختلاط ۳۰٪ هر سه آلاینده در وضعیت نسبی مناسبی از لحاظ مقدار آنها قرار دارند.

مطابق این بررسی‌ها از نقطه نظر درصد قابل قبول آلاینده‌های ورودی به واکنشگر و حفظ شرایط عملکردی موتور نظیر گشتاور خروجی موتور، مصرف سوخت و پایداری احتراق در حدود ۳۰٪ نسبت اختلاط دو سوخت شرایط بهینه ای برقرار است. لذا از نتایج اندازه گیری‌های صورت گرفته از شرایط عملکردی موتور نظیر دمای هوای ورودی، دما و فشار خروجی، درصد آلاینده ها و سایر اطلاعات مورد نیاز برای شبیه سازی در این نسبت استفاده گردید.

¹ Honeycomb-Type Catalytic Converter

جرم کلی آن ثابت می‌ماند. بنابراین استفاده از توازن جرم ترجیح داده می‌شود.

درصد حجمی حالت گاز در کل روند بدین شرح محاسبه می‌شود:

$$\varepsilon_g = \frac{V_g}{V} \quad (10)$$

درصد جرمی یک ذره $W_{k,g}$ در مجموعه بصورت نسبت چگالی ذره $\rho_{k,g}$ به چگالی کل ρ_g محاسبه می‌شود:

$$W_{k,g} = \frac{\rho_{k,g}}{\rho_g} \quad (11)$$

معادله حالت یا قانون گاز آرمانی با توجه به محدوده عملکردی دما و فشار در واکنشگر از رابطه زیر حساب می‌شود:

$$\rho_g = \frac{P_g}{RT_g} \cdot MG_g \quad (12)$$

چگالی جرمی بطور مستقیم با فشار و جرم مولی کل MG_g متناسب است و بطور عکس با دمای T_g و ثابت گاز R بستگی دارد. معادله پیوستگی بدین شرح محاسبه می‌شود:

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} = \frac{\partial \rho_g \cdot V_g}{\partial z} \quad (13)$$

که v_g در آن سرعت گاز است. معادله بقای انداره حرکت نیز با استفاده از معادله حالت پایدار داری از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۱۵]:

$$\frac{\partial P_g}{\partial z} = -A_D \cdot V_g \quad (14)$$

که A_D مساحت ویژه و P_g فشار گاز است.

۳-۴- معادله توازن انرژی

در نرم افزار FIRE علاوه بر معادلات انتقال نظیر اندازه حرکت، آنتالپی فاز گاز، معادلات تلاطم و انتقال ذرات، برای محاسبات مربوط به واکنشگر معادله توازن انرژی نیز حل می‌شود. برای یک محیط متخلخل این معادله عبارتست از:

$$\int_{V_s} \rho_s \frac{\partial (C_{p,s} T_s)}{\partial t} dV + \int_{A_s} (\bar{K} \cdot \nabla T_s) \cdot \vec{n} dS + K_h (GSA) V (T_g - T_s) + S_r \quad (15)$$

که در آن \bar{K} ماتریس انتقال حرارت، K_h ضریب انتقال حرارت جامد-گاز، GSA مساحت ناحیه هندسی بر واحد حجم، T_g و T_s دمای گاز و

مطابق شکل ضخامت کل دیواره پایه واکنشگر برابر است با:

$$\delta = \delta_{wall} + 2 \cdot \delta_{washcoat} \quad (4)$$

فاصله تکرار s برای پایه واکنشگر بدین شرح محاسبه می‌شود:

$$s = \sqrt{\frac{1}{CPSM}} \quad (5)$$

که $CPSM^1$ تعداد شبکه بر مجذور متر سطح شبکه تعریف می‌شود. قطر معادل شبکه برابر است با:

$$d_{hyd} = s - \delta \quad (6)$$

مساحت باز جلوی^۲ پایه واکنشگر برابر است با:

$$OFA = \frac{d_{hyd}^2}{s^2} = \frac{(s - \delta)^2}{s^2} \quad (7)$$

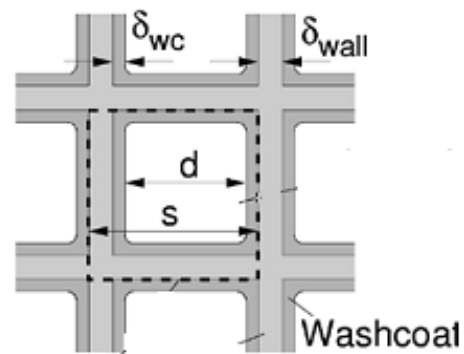
مساحت سطح هندسی (GSA) از رابطه ۵ محاسبه می‌شود:

$$GSA = \frac{4 \cdot d_{hyd}}{s^2} = \frac{4 \cdot (s - \delta)}{s^2} \quad (8)$$

از معادلات (۴-۸) نتیجه می‌شود:

$$\delta = d_{hyd} \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{OFA}} - 1 \right) = d_{hyd} \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{d_{hyd} \cdot GSA}} - 1 \right) \quad (9)$$

$$= \frac{4}{GSA} \cdot (\sqrt{OFA} - OFA)$$



شکل ۷: ساختار کانال مربعی پایه واکنشگر

۲-۴- معادلات بقای جرم یا مولها

در حالت کلی معادلات توازن جرمی یا مولی معادل هم هستند ولی بواسطه واکنش‌های شیمیایی تعداد مول‌های روند تغییر می‌یابد ولی

² Monolith's Open Frontla Area

¹ Cubic Per Square Meter

جدول ۴: معادلات واکنش های تعادلی در واکنشگر و ضرایب مربوط

CO Oxidation

CO + 1/2O2 -> CO2

Frequency Factors		Activation Temperatures	
K1	7.4074e+12 kmol.K/(m ³ .s)	E1	5726.85 degC
K2	65.5 [-]	E2	-1234.15 degC
K3	2080 [-]	E3	-634.15 degC
K4	3.98 [-]	E4	-11884.15 degC
K5	479000 [-]	E5	3459.85 degC

$$r = \frac{[K_1 \cdot e^{(-\frac{E_1}{T_s})} \cdot y_{CO} \cdot y_{O_2}] \cdot [1 + K_2 \cdot e^{(-\frac{E_2}{T_s})} \cdot y_{CO} + K_3 \cdot e^{(-\frac{E_3}{T_s})} \cdot y_{C_3H_6}]^{-2}}{[1 + K_4 \cdot e^{(-\frac{E_4}{T_s})} \cdot y_{CO} \cdot y_{C_3H_6}^2] \cdot [1 + K_5 \cdot e^{(-\frac{E_5}{T_s})} \cdot y_{NO}^2] \cdot T_s}$$

C3H6 Oxidation

C3H6 + 9/2O2 -> 3CO2 + 3H2O

Frequency Factors		Activation Temperatures	
K1	1.111e+10 kmol.K/(m ³ .s)	E1	5726.85 degC
K2	65.5 [-]	E2	-1234.15 degC
K3	2080 [-]	E3	-634.15 degC
K4	3.98 [-]	E4	-11884.15 degC
K5	479000 [-]	E5	3459.85 degC

$$r = \frac{[K_1 \cdot e^{(-\frac{E_1}{T_s})} \cdot y_{C_3H_6} \cdot y_{O_2}] \cdot [1 + K_2 \cdot e^{(-\frac{E_2}{T_s})} \cdot y_{CO} + K_3 \cdot e^{(-\frac{E_3}{T_s})} \cdot y_{C_3H_6}]^{-2}}{[1 + K_4 \cdot e^{(-\frac{E_4}{T_s})} \cdot y_{CO} \cdot y_{C_3H_6}^2] \cdot [1 + K_5 \cdot e^{(-\frac{E_5}{T_s})} \cdot y_{NO}^2] \cdot T_s}$$

NO Oxidation

NO + 1/2O2 -> NO2

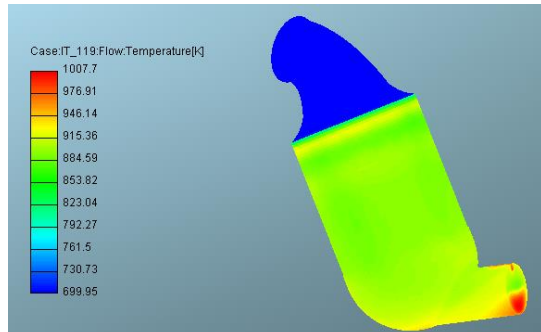
Frequency Factor

K 1.5e+08 m³/(1.5)(kmol^{0.5}.s)

Activation Energy

E 51000 k.J/kmol

$$r = K \cdot e^{(-\frac{E}{T_s})} \cdot \left(c_{NO} \cdot c_{O_2}^{0.5} - \frac{c_{NO_2}}{K_{Equ}(T_s)} \right)$$



شکل ۸: نحوه تغییرات دمایی واکنشگر

نمودار توزیع فشار در واکنشگر در شکل ۹ نشان داده شده است.

جامد، S_f منبع واکنش شیمیایی، V حجم هر کانال، V_s حجم بخش جامد شبکه و A_s سطح بخش جامد آن است.

معادله انتقال حرارت بین سطوح یک کانال با دماهای T_1 و T_2 بدین شرح اند:

$$\frac{\dot{Q}}{L} = \bar{\lambda} \cdot h \cdot \frac{T_2 - T_1}{h} \quad (16)$$

که L طول واکنشگر و λ ضریب هدایت حرارتی شعاعی مؤثر است.

۴-۴- نرخ واکنش شیمیایی

معادله واکنش شیمیایی در شکل کلی بدین صورت نوشته می شود [۱۵]:

$$\sum_{k=1}^K v'_{ki} \cdot k_k \Leftrightarrow \sum_{k=1}^K v''_{ki} \cdot k_k \quad (i=1, \dots, I) \quad (17)$$

که در آن v ضرایب تعادلی و k معرف ذره k ام است. K نیز تعداد کل ذرات شیمیایی و I تعداد کل واکنش های شیمیایی مدنظر است. نرخ واکنش q_i مربوط به واکنش i از اختلاف بین نرخ واکنش مستقیم و برگشتی بدست می آید:

$$\dot{q} = k_{f_i} \cdot \prod_{k=1}^K [c_{k,g}]^{F_{o_{ki}}} - k_{r_i} \cdot \prod_{k=1}^K [c_{k,g}]^{R_{o_{ki}}} \quad (18)$$

$F_{o_{ki}}$ و $R_{o_{ki}}$ نمادهای تمرکز ذرات حالت گاز در واکنش i است. $C_{k,g}$ نیز بدین شرح حساب می شود:

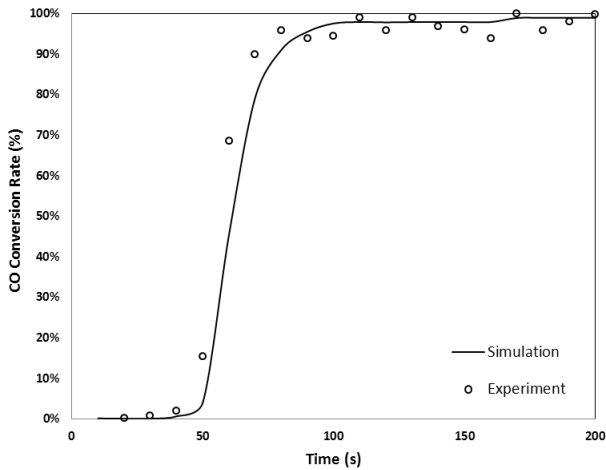
$$C_{k,g} = y_{k,g} \frac{P_g}{RT_g} \left(\frac{\text{kmole}}{\text{m}^3} \right) \quad (19)$$

معادلات واکنش های شیمیایی و ثابت های آنها در جدول ۴ نشان داده شده است [۱۳].

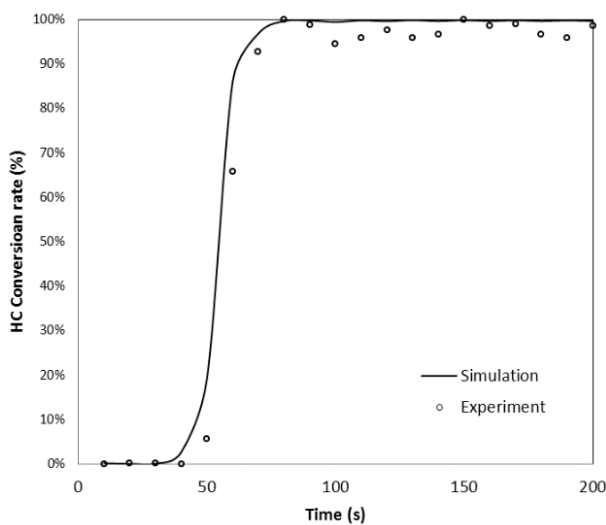
۵- بررسی نتایج

در این بخش نتایج حاصل از شبیه سازی ارائه گردیده و با نتایج حاصل از آزمون موتوری مقایسه می گردد. شکل ۸ نمودار تغییرات دمایی داخل واکنشگر را با فرض تعادل دمایی با جریان خروجی در دور ۳۰۰۰ د.د.د. نشان می دهد.

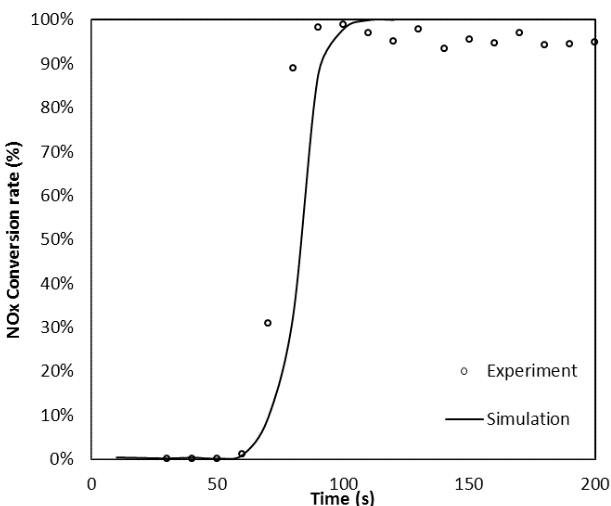
مقادیر شرایط مرزی از روی مقادیر دما و فشار و شار و شار جرمی حاصل از آزمون و همچنین شرایط محیطی آزمون و درصد عناصر شیمیایی اندازه گیری شده به عنوان شرایط اولیه قرار داده شد. مطابق این نمودار در شرایط دمایی ورودی ۷۰۰ درجه کلوین در انتهای خروجی واکنشگر در شرایط پایدار دمای جریان خروجی به دلیل فعل و انفعالات شیمیایی درون واکنشگر به طور میانگین به ۸۵۰ درجه کلوین می رسد. مطابق اندازه گیری های انجام شده در آزمون موتور، دما در بخش خروجی واکنشگر در این دور ۶۰۵ درجه سانتیگراد اندازه گیری شد که حدود ۳٪ اختلاف نشان می دهد.



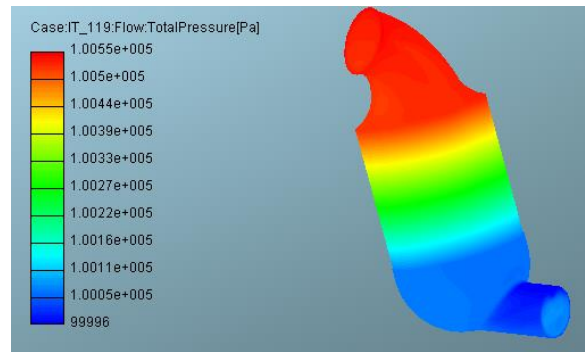
شکل ۱۱: بازده تبدیل CO در دو حالت شبیه‌سازی و نتایج تجربی



شکل ۱۲: بازده تبدیل HC در دو حالت شبیه‌سازی و نتایج تجربی



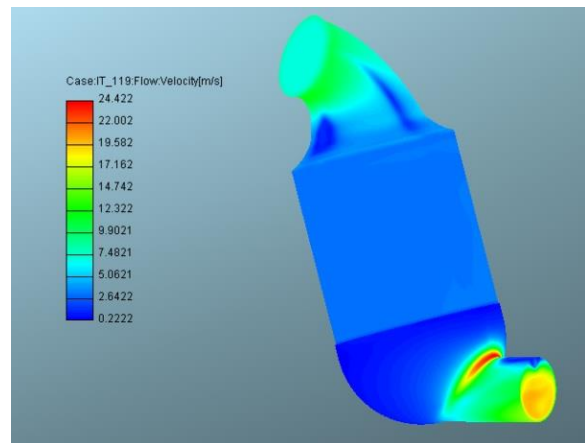
شکل ۱۳: مقایسه بازده تبدیل NOx در دو حالت شبیه‌سازی و نتایج تجربی



شکل ۹: منحنی تغییرات فشار در واکنشگر

با در نظر گرفتن فشار اتمسفری در خروجی واکنشگر بعنوان شرایط مرزی، مطابق نمودار در طول واکنشگر ۰,۵۵ KPa افت فشار مشاهده می‌شود.

در شکل ۱۰ نمودار تغییرات سرعت جریان نشان داده شده است.



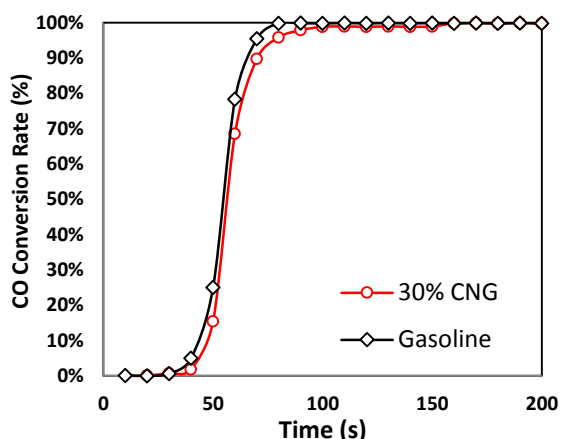
شکل ۱۰: نحوه تغییرات سرعت جریان در واکنشگر

مطابق این نمودار متوسط سرعت خروجی سیال در واکنشگر m/s ۱۶,۵ است. در مقایسه با نتایج حاصل از اندازه‌گیری آزمون موتوری، شار خروجی سیال m^3/h ۲۲۹,۵ اندازه‌گیری شد که با توجه به چگالی جریان که kg/m^3 ۰,۳۷ است و سطح مقطع خروجی واکنشگر سرعتی معادل m/s ۱۵,۸ محاسبه می‌شود که بیانگر ۴,۲٪ اختلاف است.

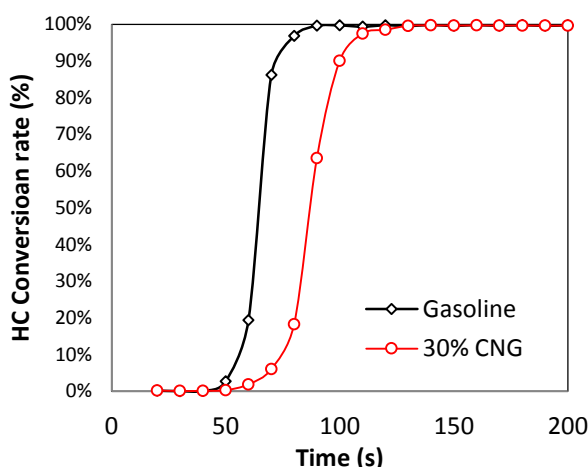
جدول ۵: جمع‌بندی مقایسه نتایج تجربی و شبیه‌سازی

پارامتر	شبیه‌سازی	تجربی	تفاوت
دمای میانگین	850 (°K)	878 (°K)	3%
سرعت جریان	16.5 (m/s)	15.8 (m/s)	4.2%

در شکل‌های ۱۱ تا ۱۳ بازده مبدل بر حسب زمان برای دو حالت شبیه‌سازی و نتایج تجربی با سوخت بنزین با نتایج حاصل از آزمون نشان داده شده است.

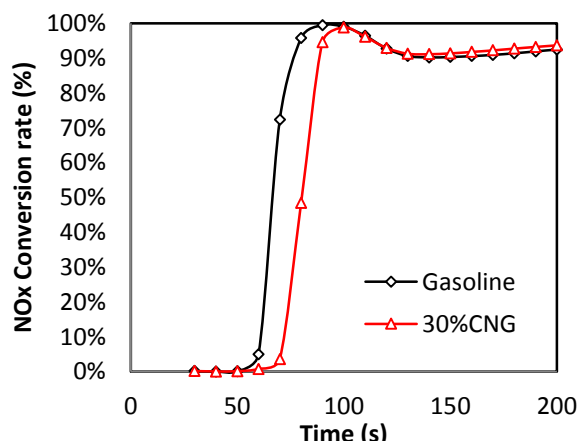


شکل ۱۵: نرخ تغییرات تبدیل CO در واکنشگر



شکل ۱۶: نرخ تغییرات تبدیل HC در واکنشگر

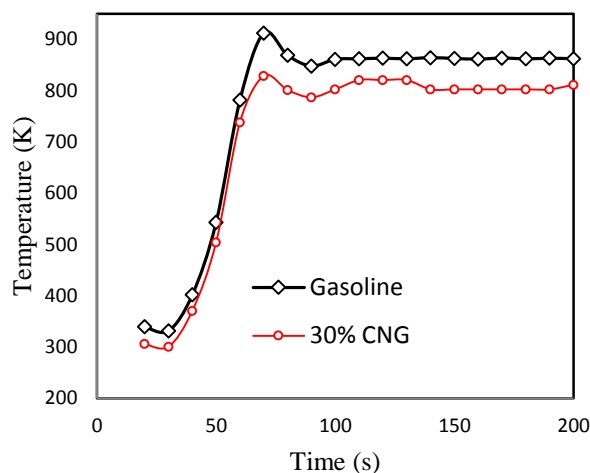
در شکل ۱۷ نرخ تبدیل آلاینده NO_x، در دو حالت نشان داده شده است.

شکل ۱۷: نرخ تغییرات تبدیل NO_x در واکنشگر

در این نمودار مشاهده می‌شود که در حالت سوخت بنزین بدلیل دمای بیشتر گازهای خروجی در واکنشگر نرخ تبدیل NO_x زودتر شروع می‌شود.

مشاهده می‌شود در مدت ۵۰ ثانیه اول دمای گاز خروجی و دمای سطح هر دو یکسان است و بنابراین کاتالیست هنوز فعال نشده و بازده تقریباً صفر است. بعد از این زمان دمای گاز خروجی موتور شروع به افزایش می‌کند تا به دمای حدود ۸۰۰ K برسد و پایدار شود. حدود چند ثانیه بعد از افزایش دمای گازها، کاتالیزور فعال شده و بازده آن به سرعت افزایش می‌یابد. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که دقت شبیه‌سازی در پیش‌بینی زمان فعال شدن و بازده حالت پایا مناسب است. پس از مقایسه شبیه‌سازی با نتایج اندازه‌گیری، در ادامه نتایج تبدیل محصولات احتراق و بازده تبدیل واکنشگر که هدف اصلی این تحقیق است، ارائه می‌شود.

شکل ۱۴ نمودار تغییرات دمایی جداره داخلی واکنشگر را در دو حالت ۱- با سوخت بنزین ۲- با نسبت ۳۰ درصد اختلاط گاز و بنزین نشان می‌دهد.



شکل ۱۴: تغییرات دمای دیوار واکنشگر در دور ۳۰۰۰ د.د. تمام بار

مطابق نمودار در صورتی که دمای واکنشگر در ابتدای واکنش برابر دمای محیط در نظر گرفته شود (۳۰۰ K) در حدود ثانیه ۶۰ به حداکثر دمایی خود می‌رسد و پس از آن در حد ثابتی باقی می‌ماند. در مقایسه با سوخت بنزین در حالت گازسوز، بدلیل دمای سردتر گازهای خروجی دود دمای واکنشگر در مقدار پایین تری روی می‌دهد و برای اختلاط ۳۰٪ گاز، در دمای ۸۰۰ K در سرعت ۳۰۰۰ د.د. قرار می‌گیرد. نرخ تبدیل CO مطابق معادلات بخش ۲، در دو حالت ذکر شده در شکل ۱۵ نشان داده شده است.

در ثانیه ۵۰ از شروع گرمایش واکنشگر و در دمای ۶۵۰ K، پس از گذران زمان گرمایش و راه اندازی واکنشگر نرخ تبدیل آلاینده CO شروع شده و با نرخ زیاد به بازده تبدیل ۹۵٪ می‌رسد. برای سوخت CNG بدلیل حجم کمتر این گاز در محصولات احتراق، واکنشگر با نرخ تبدیل بیشتری به بازده تبدیل ۱۰۰٪ می‌رسد. مطابق شکل ۱۶، نرخ تبدیل HC در واکنشگر نشان می‌دهد که در سوخت CNG شروع واکنش دیرتر صورت می‌پذیرد و در واقع واکنشگر به دمای بالاتری برای شروع واکنش نیاز دارد.

۶- نتیجه گیری

نتایج تحقیق صورت گرفته نشان می‌دهد افزودن گاز طبیعی به بنزین در موتورهای پرخوران بسیار سودمند است چراکه بدلیل افزایش عدد اکتان سوخت، باعث بهبود آلاینده‌های خروجی از موتور و همچنین افزایش مرز کوبش می‌شود و در نتیجه امکان پیش‌رسی بیشتر زمان جرقه‌زنی را فراهم می‌آورد و در نتیجه کاهش دمای دود را به همراه دارد. بررسی حاضر نشان می‌دهد در نسبت اختلاط ۳۰٪ گاز طبیعی، حداکثر توان مطلوب موتور با مقدار کاهش قابل قبول مصرف سوخت حاصل می‌شود. (جدول ۶)

جدول ۶: جمع‌بندی نتایج درصد آلاینده‌ها

سوخت	CO (ppm)	HC (ppm)	NOx (ppm)
بنزین	۵,۲	۶۹۷,۴	۵۵۶,۵۶
بنزین با ۳۰٪ گاز طبیعی (درصد تغییر)	۱,۷۵ (٪۶۶)	۳۴۹,۸ (٪۵۰)	۱۷۹۲,۹ (-٪۶۹)

در این تحقیق واکنشگر شیمیایی موتور پرخوران اشتعال جرقه‌ای توسط نرم افزار Fire، شبیه سازی گردید و با حل معادلات پیوستگی، بقای جرم و انرژی منحنی تغییرات مشخصات دینامیکی گاز عبوری شامل فشار، سرعت و دمای جداره واکنشگر مطالعه شد. همچنین با حل معادلات واکنش های شیمیایی و با استفاده از معادلات نفوذ جرم در نسبت اختلاط بهینه ۳۰ درصد و در دور ۳۰۰۰ د.د.د. هنگام استفاده از هر یک از سوخت‌های بنزین و گاز طبیعی نرخ تبدیل گونه‌های شیمیایی با یکدیگر مقایسه گردید.

نتایج نشان می‌دهد نرخ تبدیل گونه‌ها با سپری شدن نزدیک به ۵۰ ثانیه از شروع کارکرد موتور و عبور جریان با رسیدن به دمای ۶۵۰ کلوین شروع می‌شود و با نرخ شدیدی به حداکثر مقدار خود می‌رسد. همچنین در حالت استفاده از سوخت گاز طبیعی به دلیل اکسیدشدن سخت تر مولکول‌های ترکیبات متان، واکنش HC دیرتر و در دمای گرمتری اتفاق می‌افتد ولی برای آلاینده‌گی CO و NOx رفتار واکنشگر برای نرخ تبدیل گازها با اندکی اختلاف نزدیک به یکدیگر است.

تشکر و قدردانی

نویسندگان این مقاله، مراتب تشکر و قدردانی خود را از واحدهای نگاشت و آزمایشگاه شرکت تحقیق و طراحی و تولید موتور ایران خودرو (ایپکو) اعلام می‌دارند.

مراجع

- [2] E. Pipitone, S. Beccari. Performances improvement of a S.I. CNG bi-fuel engine by means of double fuel injection. SAE Technical Paper. 2009-24-0058, 2009.
- [3] Monnier, G., Method for controlling the operation of an engine with a single-fuel or multiple-fuel injection mode. 2008, Google Patents.
- [4] Yuetao Zhang, Experimental and Numerical Study of the Behavior of Three-Way Catalytic Converters under Different Engine Operation Conditions, August 2005, in partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy, Massachusetts Institute of Technology, September 2005.
- [5] E.P. Brandt, Yanying Wang, and J. W. Grizzle, Dynamic Modeling of a Three-Way Catalyst for SI Engine Exhaust Emission Control, IEEE TRANSACTIONS ON CONTROL SYSTEMS TECHNOLOGY, 1999.
- [6] Joachim Braun, Thomas Hauber, Heike Többen, Julia Windmann, Peter Zacke, Three-Dimensional Simulation of the Transient Behavior of a Three-Way Catalytic Converter, Society of Automotive Engineers, SAE 2002-01-0065.
- [7] Sallamie, N. and K.A. Noori, Transient simulation of three-way catalytic converter. 2003, SAE Technical Paper.
- [8] Obiols, J., et al., Potential of Concomitant Injection of CNG and Gasoline on a 1.6L Gasoline Direct Injection Turbocharged Engine, S.T. Paper, Editor. 2011.
- [9] H.S. Gandhi, G.W. Graham and R.W. McCabe, Automotive exhaust catalysis, Journal of Catalysis 216 (2003) 433-442.
- [10] J. Kašpar, P. Fornasiero and N Hickey, Automotive catalytic converters: current status and some perspectives, Catalysis Today 77 (2003) 419-449.
- [11] F. Sun, X. Chen, D. Ting and A. Sobiesiak, Modeling operation of HCCI engines fueled with ethanol, America Control Conference, Portland, OR, USA, June 8-10, 2008
- [12] Coltrin M.E., Kee R.J., Rupley F.M. and Meeks E. "Surface Chemkin III: A Fortran Package for Analyzing Heterogeneous Chemical Kinetics at a Solid Surface-Gas Phase Interface". Sandia National Laboratories Report, SAND96-8217 Unlimited Release, 1996
- [13] M. Momeni Movahed, H. Basirat Tabrizi, M. Mirsalim, Experimental investigation of the concomitant injection of gasoline and CNG in a turbocharged spark ignition engine, Energy Conversion and Management 80 (2014) 126-136.
- [14] Brinkmeier, Clemens. "Automotive three-way exhaust aftertreatment under transient conditions: measurements, modeling and simulation." (2006).
- [15] Kaviany, Massoud. "Principles of heat transfer in porous media Springer Science & Business Media", 2012.

- [1] EPA 230-R-99-001, Indicators of the Environmental Impacts of Transportation, October 1999.



Numerical and experimental investigation of flow boiling heat transfer coefficient according to engine operating condition

A. Raei Tabar^{1*}, A. Hamidi², H. Ghadamian³

¹ Islamic Azad University, Science and Research Branch, Tehran, Iran, Raeitabar@riau.ac.ir

² Tehran University, Chemical Department, Tehran, Iran, aahamidi@ut.ac.ir

³ Energy and Material Research Center, Karaj, Iran, h.ghadamian@gmail.com

*Corresponding Author

ARTICLE INFO

Article history:

Received: 27 October 2015

Accepted: 11 June 2017

Keywords:

Catalyst

Turbocharged engine

CNG and Gasoline combination

Exhaust emission

ABSTRACT

This paper reports the studies on how the three-way catalytic converters behave under full load condition of a 1.7L turbocharged engine with the mixed CNG and Gasoline fuels. The main focus of the work is the pollution reduction of the three-way catalyst. Results show that the amount of pollution is dependent on how much percent CNG is mixed in the exhaust. A numerical model was investigated with the Fire software to characterize the amount of the exhaust pollutants HC, Co and NOx. Achieving a minimum percentage of pollutant in front of the matrix surface of the catalytic converter is an important target in the development of an engine, due to thermodynamic, chemical and cost requirements. The flow distribution influences the catalyst's conversion rate, as well as its resistance to ageing and the necessary precious metal loading. The main objective of this simulation is to help us understand how the catalyst works. The simulation interprets some of the phenomena observed in the experiments, also to shed lights on the mechanisms of catalytic actions. The simulation results the behavior of HC, CO and NOx at the output of catalyst.

