



## بررسی تأثیر چرخه‌های رانندگی بر فرسایش واکنشگر و آلایندگی خودروی احتراق داخلی

پرهام طاهرخانی<sup>۱</sup>، شهاب مافی<sup>۲</sup>، امیرحسین کاکایی<sup>۳\*</sup>

<sup>۱</sup> کارشناسی ارشد دانشکده خودرو دانشگاه علم و صنعت، تهران، ایران، [p\\_taherkhani@auto.iust.ac.ir](mailto:p_taherkhani@auto.iust.ac.ir)

<sup>۲</sup> دانشجوی دکتری دانشکده خودرو دانشگاه علم و صنعت، تهران، ایران، [s\\_mafi@auto.iust.ac.ir](mailto:s_mafi@auto.iust.ac.ir)

<sup>۳</sup> دانشیار دانشکده خودرو دانشگاه علم و صنعت، تهران، ایران، [Kakae\\_ah@iust.ac.ir](mailto:Kakae_ah@iust.ac.ir)

\* نویسنده مسئول

### اطلاعات مقاله

تاریخچه مقاله:

دریافت: ۲۰ آذر ۱۳۹۸

پذیرش: ۲۹ بهمن ۱۳۹۸

کلیدواژه‌ها:

مبدل واکنشگر سه‌راهه

فرسایش

شبیه‌سازی سینماتیکی خودرو

چرخه رانندگی

آلایندگی

### چکیده

فرسایش واکنشگر نقش مهمی بر آلایندگی تولید شده توسط خودروها در طی عمر خودرو ایفا می‌کند. شناخت بهتر عوامل مؤثر بر فرسودگی واکنشگر و تعویض به موقع آن می‌تواند تأثیر شگرفی بر کاهش آلایندگی ناشی از خودروهای احتراق داخلی و بهبود کیفیت هوای کلان‌شهرها داشته باشد. یکی از عوامل مهمی که می‌تواند بر عملکرد و عمر واکنشگر تأثیرگذار باشد، شرایط رانندگی یا همان چرخه رانندگی روزانه است. در این مقاله این تئوری مورد تحقیق و بررسی قرار می‌گیرد که فرسایش واکنشگر در چرخه‌های رانندگی مختلف رفتار متفاوتی داشته و از همین برای میزان مسافت پیشنهادی توسط سازندگان واکنشگر برای تعیین حد فرسایش باید مطابق با چرخه‌های رانندگی بومی باشد. به منظور بررسی این ایده از شبیه‌سازی سینماتیکی خودرو به همراه واکنشگر سه‌راهه در چرخه رانندگی با نرم‌افزار GT-Suite استفاده می‌شود. نرخ فرسایش متناسب با چرخه رانندگی مبنا یا همان NEDC محاسبه شده و برای استفاده از این نرخ برای چرخه رانندگی دیگر از وابستگی مسافت معادل برای مقایسه چرخه رانندگی با چرخه مبنا از منظر کاهش عمر واکنشگر، استفاده می‌شود. مقایسه واکنشگر در یک مسافت مشخص در دو حالت مشاهده پدیده فرسایش و عدم مشاهده پدیده فرسایش، ارزش موضوع فرسایش واکنشگر مشخص می‌شود. اختلاف آلایندگی تولید شده وابسته به چرخه بین حالت تازه و فرسوده از ۲ تا ۵ برابر اختلاف وجود دارد. در چرخه‌های رانندگی که از داده‌های رانندگی در تهران توسعه یافته‌اند، با تعویض به موقع واکنشگر در ۷۴ هزار کیلومتر مسافت طی شده توسط خودرو، مقدار آلایندگی به یک پنجم حالت کلی می‌رسد.



تمامی حقوق برای انجمن علمی موتور ایران محفوظ است.

## ۱- مقدمه

موضوع حفاظت از محیط زیست امروزه به یکی از مهمترین دغدغه‌های بشر تبدیل شده است. آلودگی ناشی از صنعت خودروسازی به طور مستقیم اثر منفی بر محیط زیست و سلامت انسان وارد می‌کند. این آلاینده‌ها عمدتاً شامل اکسید نیتروژن، کربن مونواکسید و هیدروکربن‌های نسوخته‌اند. در صنعت خودروسازی با استفاده از مبدل واکنشگر مقدار آلاینده‌های ذکر شده را کاهش می‌دهند. رایج‌ترین نوع واکنشگر که در اکثر خودروهای بنزینی قرار می‌گیرند، واکنشگر سه راه<sup>۱</sup> است. واکنشگر سه راه معمولاً به شکل لانه عسلی با اندازه ۰,۱۹ - ۰,۵۸ میلی‌متر مربع که ساختار لوله‌های آن معمولاً از جنس سرامیک به صورت  $2Al_2O_3 - 5SiO_2 - 2MgO$  ساخته می‌شود [۱].

در مبدل واکنشگر سه متغیر مهم برای تعریف واکنشگر بیان شده است. یکی از مهم‌ترین متغیرهای اندازه‌گیری شده در واکنشگر، درصد تبدیل کربن مونواکسید، اکسید نیتروژن و هیدروکربن نسوخته است. این متغیر را با اندازه‌گیری مقدار آلاینده‌های قبل و بعد از واکنشگر می‌توان محاسبه نمود [۲].

یکی دیگر از متغیرهای اندازه‌گیری واکنشگر دمای خاموش است. دمای خاموش معمولاً به دمایی که در آن واکنشگر ۵۰ درصد، درصد تبدیل داشته باشد گفته می‌شود [۳].

سومین متغیر اندازه‌گیری واکنشگر مقدار سرب موجود در واکنشگر است. سرب در بدنه واکنشگر برای ذخیره ساز اکسیژن مورد استفاده قرار می‌گیرد که معمولاً با اکسیر کروم برای پایداری حرارتی آن همراه می‌شود [۴].

عملکرد واکنشگر تابع لامبدا است. بهترین عملکرد واکنشگر زمانی صورت می‌گیرد که عدد لامبدا یک باشد. اما در شرایط رانندگی، موتور در بارها و سرعت‌های متفاوتی عمل می‌کند که منجر به آن می‌شود تا عدد لامبدا از مقدار ۱ فاصله بگیرد در نتیجه موجب افزایش آلودگی می‌شود. یک ذخیره ساز اکسیژن می‌تواند اثر نامطلوب لامبدا بر عملکرد واکنشگر را کاهش دهد. در شرایط مخلوط فقیر اکسیژن اضافی در واکنشگر ذخیره می‌شود و در شرایط مخلوط غنی، مقدار اکسیژن کمبود از منبع ذخیره شده جبران می‌شود. به این روش مقدار آلاینده‌های را در شرایط عملکردی غنی و فقیر موتور می‌تواند کاهش یابد [۵].

سدرون و چنگ مشاهده نمودند که با افزایش فشار برگشتی گاز خروجی، آنتالپی گاز خروجی موتور در ورودی به مبدل واکنشگر افزایش می‌یابد. این افزایش آنتالپی موجب سرعت بخشیدن زمان رسیدن به دمای خاموش می‌شود [۶].

آنا فاتالی شرایط مختلف فرسایش سریع واکنشگر را پیشنهاد نموده و برای هر کدام واکنشگر را با حالت فرسوده مقایسه نموده است.

همچنین برای تخمین دما و نرخ واکنش شیمیایی در واکنشگر روابطی پیشنهاد داده است. مهمترین نتیجه ایشان این است که تمام واکنشگرهای فرسوده شده مقدار ظرفیت ذخیره ساز اکسیژن کمتری از حالت تازه دارد [۷].

توماس و همکاران در سال ۲۰۱۹ نشان دادند که با فرسایش واکنشگر میانگین اندازه ذرات خروجی از واکنشگر از ۳,۹ نانومتر برای حالت تازه تا ۳۶ نانومتر برای واکنشگر فرسوده به مدت ۱۰۰ ساعت در اجاق افزایش می‌یابد. علاوه بر افزایش میانگین اندازه ذرات، توزیع ذرات نیز گسترش یافته است [۸].

اندازه‌گیری نرخ واکنش‌های شیمیایی در آزمایشگاه به خودی خود یک شاخه تخصصی علم و مهندسی است. مهم این است که این نرخ یک ویژگی ذاتی یک سامانه شیمیایی داده شده است و شامل عملکرد فیزیکی مانند انتقال یا انتقال گرما و جرم نمی‌شود. کتاب‌های مختلفی زمینه سرعت واکنش شیمیایی را با جزئیات ارائه نموده‌اند [۹-۱۱].

برای سامانه واکنشگری ناهمگن چندین مرحله از جذب، جذب گونه بر سطح واکنشگر و همچنین انتقال جرم خارجی، باید در حالی که نرخ واکنش مؤثر به صورت معادله در می‌آید در نظر گرفته شوند [۱۲].

شبیه‌سازی سه بعدی برای واکنشگر سه راه رایج نیست و اکثر کارهای عددی به صورت دو بعدی متقارن و یا یک بعدی انجام می‌شود. برای بررسی انتقال حرارتی و انتقال جرم واکنشگر در حالت‌های عددی دو بعدی و یک بعدی دو عدد ضروری و ناسلت بسیار مهم هستند [۱۳].

مطالعات گذشته زیادی [۱۴-۱۷] به بررسی رفتار سیال در مقابل واکنشگر انجام شده و تغییرات شعاعی جریان گزارش شده است با این وجود تغییر در این رفتار شعاعی در طی چرخه رانندگی و تأثیر آن بر عملکرد مبدل به خوبی بیان نشده است.

شبیه‌سازی عددی [۱۸, ۱۹] به آشکار کردن این تأثیر کمک می‌کند و یک شبیه‌سازی سریع و قوی برای شبیه‌سازی بخش فیزیکی و شیمیایی مبدل واکنشگر به منظور تسریع بخشیدن به کار، کاهش هزینه تمام شده با حالت تست آزمایشگاهی استفاده می‌گردد.

بنابراین شبیه‌سازی ریاضی باید یک سامانه گذرا و همراه با واکنش‌های شیمیایی، پوشش سطحی، معادلات انتقال جرم و انتقال حرارت را برای شرایط ورودی گذرای مختلف حل نماید. شبیه‌سازی‌های یک بعدی [۲۰, ۲۱] از مونولیت بر اساس رویکرد مسیر تکی برای مطالعه عملکرد واکنشگر استفاده می‌شود. هرچه از عمر یک واکنشگر می‌گذرد، عملکرد آن کاهش می‌یابد. عوامل فرسایش واکنشگر به طور خلاصه در جدول ۱ آمده است.

<sup>1</sup> Three-way catalyst (TWC)

جدول ۱: عوامل فرسایش واکنشگر

سازوکار فرسایش	شبیه سازی فرسایش	توضیح مختصر
مسمومیت	شیمیایی	جذب گونه شیمیایی به واسطه واکنش شیمیایی بر روی مبدل واکنشگری در نتیجه کاهش صفحه مبدل واکنشگری
رسوب	مکانیکی	رسوب گونه‌ها هنگام عبور سیال از مبدل واکنشگری و حفره‌های آن و گرفتگی آن‌ها
حرارتی	حرارتی	تأثیرات دمایی چون کاهش مساحت سطح مؤثر، مساحت مواد پشتیبان و صفحه‌های واکنش
تشکیل بخار	شیمیایی	واکنش گاز با مبدل واکنشگری و تولید ترکیبات فرار
واکنش بخار-جامد و جامد-جامد	شیمیایی	واکنش سیال با مواد پشتیبان و تولید حالت‌های غیر فعال
سایش / خوردگی	مکانیکی	از دست دادن مواد مبدل واکنشگری به علت خوردگی سطح

مبدل‌های واکنشگر صنعت خودروسازی که دمایی نزدیک به ۱۰۰۰ درجه سلیسیوس دارد صحت دارد. یکی دیگر از منابع فرسایش واکنشگر می‌توان به مسمومیت که ممکن است توسط گاز خروجی در فرآیند جذب سطحی رخ دهد و باعث گرفتگی سایت‌های فعال واکنشگر شود اشاره نمود [۲۲-۲۵].

غیرفعال سازی واکنشگر به معنی از دست دادن فعالیت یا گزینش واکنشگر در طی زمان است. دلایل مختلفی برای غیرفعال سازی واکنشگر وجود دارد. برای مثال یک واکنشگر ممکن است به دلیل حضور گونه آلوده کننده در محفظه دچار مسمومیت گردد. در این حالت سطوح، منافذ و حفره‌ها ممکن است به وسیله کربن پر شده یا به وسیله واکنش‌های هیدرکربینی در سطح پخته شود. واکنشگر مورد استفاده برای کاهش آلایندگی موتور بنزینی می‌تواند به دلیل کیفیت سوخت و یا مواد افزودنی به روغن دچار پدیده مسمومیت گردد.

اگر مبدل واکنشگری در دمایی بالا فعالیت داشته باشد می‌تواند دچار فرسایش حرارتی گردد. علت فرسایش واکنشگر را می‌توان بر اساس ذات طبیعی خود به سه گروه شیمیایی، مکانیکی و حرارتی نیز تقسیم نمود.

### ۳- شبیه سازی

دانش درستی از ترمودینامیک و سامانه شیمیایی واکنش دهنده‌ها تحت شرایط مختلف پیش نیاز مهم برای فهم بهتر تحلیل مهندسی واکنش در واکنشگر است و تحلیل‌های پایه‌ای ترمودینامیکی به شناخت شرایط عملکردی مناسب و راهبردهای مختلف برای رسیدن به عملکرد ایده‌آل کمک می‌کند.

تئوری‌ها و ابزارهای شبیه سازی سازی مورد نیاز برای اجرای این توابع به خوبی توسعه یافته اند و هیچ مشکلی در مورد سخت افزار واکنشگر واقعی و دینامیک سیال موجود ندارند.

درک شیمی به افراد اجازه می‌دهد تا تغییرات کلی را به واکنش‌های شیمیایی اصلی (مطابق با ترمودینامیک) نشان دهند. پس از آن تحلیل مهندسی واکنش می‌تواند به سرعت این واکنش‌های شیمیایی

از میان عوامل فرسایش معرفی شده، پدیده تخریب حرارتی و مسمومیت تأثیر بیشتری بر عمر واکنشگر دارند به همین دلیل در روش‌های پیرسازی واکنشگر، برای سرعت بخشیدن به فرایند فرسایش واکنشگر، مبدل واکنشگر را تحت شار و دمایی بالا مطابق استانداردهای مخصوص قرار می‌دهند تا در مدت زمان کوتاه، مشابه عمر مبدل واکنشگر در مسافت خاصی گردد.

در این مقاله، هدف بررسی یک مبدل واکنشگر در حالت تازه و فرسوده، به دست آوردن رابطه‌ای بین عمر واکنشگر بر حسب مسافت طی شده و بررسی تأثیر چرخه رانندگی بر عمر واکنشگر است. به این منظور از مبدل واکنشگر خودروی سمند با موتور ملی استفاده می‌شود. دو عامل مهم فرسایش واکنشگر یعنی مسمومیت و تخریب حرارتی با دو ضریب وارد شبیه سازی یک بعدی تهیه شده می‌شود. همچنین عمر واکنشگر تابعی از مسافت بر حسب مسافت مینا که در ایجا چرخه مینا NEDC است، تهیه شده و چرخه‌های رانندگی مختلف دیگر از منظر کاهش عمر واکنشگر با چرخه رانندگی مینا مقایسه می‌شود و یک تابع تحت عنوان مسافت معادل به دست می‌آید.

آیا پدیده کاهش عمر واکنشگر در مسافت مشابه تفاوتی در آلایندگی تولید شده دارد؟ مقدار مسافت پیموده شده با فرض کاهش عمر واکنشگر برای پاس نمودن استانداردهای یورو چه مقدار است؟ در ادامه این مقاله به است دو سوال پاسخ مناسب داده می‌شود.

### ۲- عوامل فرسایش

فرسایش واکنشگر موجب عملکرد ضعیف واکنشگر و در نتیجه آلودگی بیشتر می‌شود. به همین دلیل مطالعه درباره فرسایش واکنشگر یکی از مهم ترین مطالعات پیرامون واکنشگر است.

عمر مفید لازم برای سامانه‌های بعد از احتراق در اتحادیه اروپا ۱۲۰ هزار کیلومتر است به همین دلیل باید مبدل واکنشگر در این بازه عملکرد بالایی از خود نشان دهد.

یکی از اصلی ترین منبع فرسایش واکنشگر در محیط زیست قرار گرفتن واکنشگر در دمایی بالا است. این پدیده به خصوص در

۱. تحت فرضیه نادیده گرفتن حرارت از دست داده شده به محیط و توزیع یکنواخت مقادیر ذخیره شده در می آن صفحه ورودی یا به بیان دیگر شرط مرزی برای هر مسیر واکنشگری غلبه می کند که به نوبه خود می تواند توسط یک مسیر واحد نشان داده شود.
  ۲. تغییرات انرژی پتانسیل و جنبشی در طول واکنشگر در نظر گرفته نمی شود.
  ۳. واکنش های حالت گاز، به دلیل دماهای محدود و زمان اقامت کم جریان گاز درون مونولیت برای شرایط عملیاتی معمول در کاربردهای خودرو همگن در نظر گرفته نمی شود.
  ۴. فشار ثابت در طول مسیر در نظر گرفته می شود زیرا که تغییرات فشار در راستای مسیرها بسیار ناچیز هستند و تأثیری بر واکنش دهنده ها ندارند.
  ۵. تعادل کلی جرم به صورت استاتیک است زیرا که جرم کلی تنها به مقدار بسیار کم توسط جذب و دفع واکنش دهنده ها (ذخیره ساز اکسیژن) تحت تأثیر قرار می گیرد.
  ۶. انتشار شار حرارتی و جرم در حالت گازی نسبت به همرفت آن کوچک است بنابراین در نظر گرفته نمی شود.
  ۷. انتشار گونه ها در راستای محور در واشکوت به دلیل کوچک بودن آن در مقایسه با انتقال شار جرم در نظر گرفته نمی شود.
  ۸. یک میدان میانگین تقریبی اعمال می شود از این رو سطح واشکوت به صورت یکنواخت با توزیع رندوم گونه جذب کننده دیده می شود.
  ۹. وضعیت سطح واکنشگر را می توان با دما و پوشش سطحی که در مقیاس ماکروسکوپ قرار دارد و در سطح میکروسکوپ میانگین گرفته می شود توصیف نمود.
  ۱۰. برای واشکوت و ماده پشتیبان در راستای شعاعی، گرادیان دما و غلظت حل نمی شود.
- یکی از ورودی های مورد نیاز برای استفاده از شبیه سازی واکنشگر، مقدار نسبت مولی گونه های شیمیایی خروجی از موتور است. برای به دست آوردن این نسبت مولی ها از روش شبیه سازی تعادلی شیمیایی استفاده می شود.
- برای شبیه سازی مجموع خودروی سمند با واکنشگر با فرض اینکه واکنشگر در طی فرایند پیر شدن تأثیری بر عملکرد موتور ندارد، شبیه سازی مجموعه خودرو به صورت دو شبیه سازی، یکی برای خودرو سمند و موتور EF7 و شبیه سازی دیگر برای واکنشگر با شرط مرزی اولیه، مجزا تبدیل شده است.
- به همین دلیل روابط تعادل شیمیایی گونه ها مورد استفاده قرار می گیرد. شبیه سازی خودرو مورد استفاده، شبیه سازی خودروی سمند با موتور EF7 است که بر پایه اطلاعات شرکت ایپکو در آزمایشگاه سامانه های انتقال قدرت در دانشکده خودرو دانشگاه علم و صنعت تهیه و توسعه داده شده است.

رخ داده تمرکز نمایند. میزان مؤثر واکنش های شیمیایی اغلب به سرعت واکنش ذاتی و فرآیندهای مختلف انتقال مانند مخلوط کردن، انتقال گرما و جرم بستگی دارد.

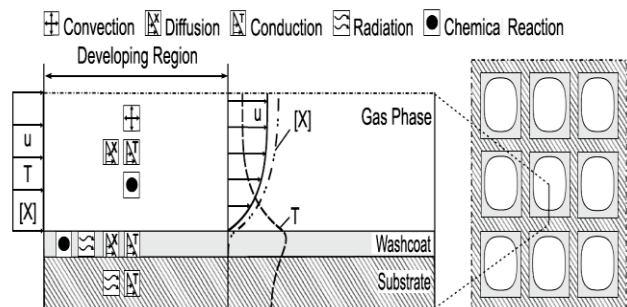
تجزیه و تحلیل فرآیندهای انتقال و تعامل آنها با واکنش های شیمیایی فرآیندهای واکنشگری صنعتی برای مواد شیمیایی عالی و تخصص می تواند بسیار پیچیده باشد و به طور دقیق با دینامیک سیال مرتبط است. چنین تجزیه و تحلیل ترکیبی از فرآیندهای شیمیایی و فیزیکی هسته اصلی مهندسی واکنش شیمیایی است.

بنابراین تحلیل مهندسی واکنش شیمیایی به طور ذاتی شامل طیف گسترده ای از مقیاس ها، از مقیاس اتمی که واکنش های ابتدایی در این محدوده رخ می دهد، تا مقیاس واکنشگر (یا حتی در برخی موارد به تجزیه و تحلیل چرخه عمر / عمر جهانی) می پردازد.

ساختار واکنشگر مونولیتی استفاده شده در صنعت خودرو شامل تعداد بسیار زیادی از مسیرهای کوچک موازی دارای میدان جریان درونی آرام است. ماده واکنشگر بر روی سطوح منفذها آغشته شده و واشکوت نامیده می شود که مسیر بستر را در امتداد محیط مرطوب خود پوشش می دهد.

انتشار واکنش دهنده ها درون حالت گازی و منفذهای واشکوت مطابق واکنش های کاتالیزی که به دلیل وجود فلزهای گران بها بر روی سطوح بین جامد و گاز رخ می دهد است. برای شبیه سازی واکنشگر از شبیه سازی تهیه شده توسط هولدر<sup>۱</sup> استفاده می شود [۲۶].

پدیده های فیزیکی و شیمیایی رخ داده بر روی مونولیت در شکل ۱ نشان داده شده است. در حالت گازی همرفت و انتشار انتقال جرم گشتاور و انرژی در راستای شعاعی و محوری رخ می دهد. در پایین دست ناحیه توسعه یافته شکل جریان آرام سرعت، دما و غلظت گونه ها توسعه یافته است. در منفذهای واشکوت انتقال به واسطه همرفت و گشتاور به واسطه انتشار را می توان در نظر نگرفت. بر عکس انتقال جرم دیفیوژن ممکن است تأثیر قابل توجهی در رفتار واکنشگر داشته باشد.



شکل ۱: نمای لانه عسلی مبدل واکنشگر و معادلات حاکم بر هر ناحیه [۲۶]

تعادل انرژی جامد تحت تأثیر انتقال انتشار (رسانش)، تشعش و واکنش شیمیایی (انتالپی واکنش) است. فرضیات گرفته شده در این شبیه سازی به صورت زیر است.

<sup>1</sup> Holder

در این رابطه  $X$  مقدار مسافت معادل یعنی ۱۲۰ هزار کیلومتر،  $t$  زمان ماندگاری واکنشگر در اجاق و برابر ۴۰ ساعت،  $t$  زمان عمر واکنشگر بر حسب ساعت و  $X$  مسافت طی شده بر حسب کیلومتر است. با اعمال این نکاشت شکل نهایی پراکندگی بر حسب کیلومتر به صورت رابطه ۴ می‌شود.

$$D = \frac{4 \times 10^{-4}}{\left( \frac{5.96x}{1.5 \times 10^{10}} + \frac{1}{2450} \right)} + 0.02 \quad (۴)$$

متاسفانه بر خلاف پراکندگی، رابطه ای برای تغییرات سایت فعال در دسترس نمی‌باشد به همین دلیل ابتدا با توجه به مقدار پراکندگی به دست آمده، مقدار سایت فعال برای حالت کاملاً فرسوده یا در مسافت ۱۲۰ هزار کیلومتری برای چرخه NEDC مقدار سایت فعال به دست می‌آید. در این حالت لازم است مقدار سایت فعال به گونه ای تعیین شود تا فرض فیزیکی مسئله برقرار گردد و در عین حال مقدار سایت فعال به کمترین مقدار خود برسد. در این صورت مقدار سایت فعال بین دو عدد ۰,۰۰۸ به دست آمده است. نمودار تغییرات سایت فعال بین دو نقطه واکنشگر تازه و فرسوده با توجه به مطالعات اشار و تجربیات شخصی به صورت رابطه ۵ فرض شده است.

$$A = 0.17 \times \exp[-6 \times 10^{-5} x] \quad (۴)$$

#### ۴- نتایج و بحث

مشخصات و خواص به دست آمده برای پیرسازی واکنشگر بر حسب چرخه مبنای تست یعنی NEDC به دست آمده است. برای اینکه بتوان از چرخه‌های مختلف نیز استفاده نمود باید رابطه‌ای بین چرخه رانندگی مدنظر و چرخه مبنای به دست آورد. برای مقایسه دو چرخه متغیرهای بسیار زیادی مانند سرعت، زمان توقف، شتاب، انرژی جنبشی و ... وجود دارد.

در اینجا چون هدف محاسبه و شبیه‌سازی پیرسازی واکنشگر است باید به دنبال متغیرهایی گشت که اثر بیشتری بر عمر واکنشگر می‌گذارند با توجه به مطالعات اشار صورت گرفته و شبیه‌سازی واکنشگر ارائه شده از می‌ان متغیرهای چرخه رانندگی دما، زمان چرخه، مسافت طی شده در چرخه و شار ورودی به واکنشگر اثر بخشی بیشتری در عمر واکنشگر دارد به همین منظور این چهار متغیر مورد بررسی قرار گرفته است. به این نکته باید توجه داشت که در شار عبوری از واکنشگر با توجه به اهمیت بالای آلاینده‌های کربن مونواکسید، اکسید ازت و هیدروکربن نسوخته و همچنین جرم کم این گونه‌ها نسبت به سایر گونه‌هایی چون نیتروژن، کربن دی اکسید و بخار آب از سه گونه برای مقایسه شار دو چرخه استفاده می‌شود.

قبل از ارائه معادلات مختلف، ابتدا تحلیل حساسیتی بر روی چهار متغیر اصلی یعنی دما، کربن مونواکسید، اکسید ازت و هیدروکربن

نرخ تفجوشی<sup>۱</sup> به صورت نمایی با دما افزایش می‌یابد. فلزات نسبتاً سریع در اکسیژن و نسبتاً کند در هیدروژن دچار تفجوشی می‌گردند. بنابراین وابسته به جنس ماده پشتیبان، جذب نشدن فلز می‌تواند با قرار گرفتن در دمای بالا تسهیل یابد. همچنین وجود بخار آب موجب افزایش نرخ تفجوشی ماده پشتیبان می‌شود. نرخ تفجوشی با معادله زیر تقریب زده می‌شود.

$$-\frac{d(D/D_0)}{dt} = k_s \left( \frac{D}{D_0} \right)^n \quad (۱)$$

که  $k_s$  نرخ حرارتی،  $D_0$  پراکندگی<sup>۲</sup> اولیه،  $D$  پراکندگی موجود و  $n$  مرتبه تفجوشی که معمولاً بین ۳ تا ۱۵ است، است. متاسفانه معادله ۱ به طور کلی برای فرآیند تفجوشی معتبر نیست، زیرا فرض شده است که مساحت سطح یا پراکندگی در نهایت با گذشتن زمان کافی به صفر می‌رسد در حالی که در واقعیت در زمان مشخص و فشار اتمسفر، پراکندگی محدود یا غیر صفر در زمان طولانی از تفجوشی مشاهده شده است [۲۷]. به همین دلیل فیتنس<sup>۳</sup> به کمک همکاران معادله اصلاح شده زیر را ارائه نموده است [۲۸].

$$-\frac{d(D/D_0)}{dt} = k_s \left( \frac{D}{D_0} - \frac{D_{eq}}{D_0} \right)^m \quad (۲)$$

که اضافه نمودن جمله  $-\frac{D_{eq}}{D_0}$  برای بررسی رویکرد همبستگی مشاهده شده از پراکندگی معمول در برابر منحنی زمان به پراکندگی محدود  $D_{eq}$  در زمان بینهایت است.  $m$  مرتبه تفجوشی بوده و ۱ یا ۲ است. مقدار پراکندگی در رابطه ۲ بر حسب واکنشگر فرسوده شده در اجاق به دست آمده است یعنی زمان موجود در این رابطه بر اساس زمان ماندن در اجاق مطرح شده است.

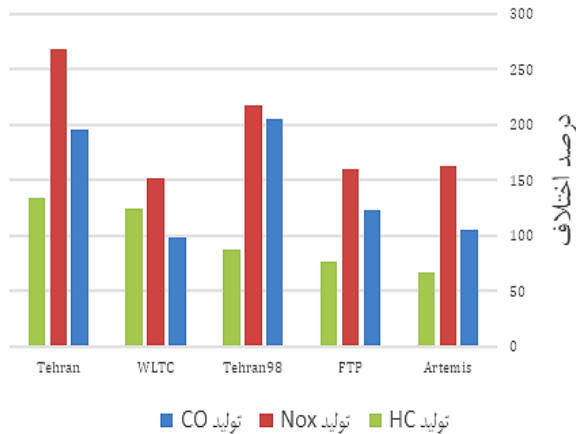
در این راستا ابتدا واکنشگر فرسوده شده تحت شرایط استاندارد ایران خودرو به مدت ۴۰ ساعت درون اجاق فرض شده که این مدت زمان تحت شرایط خاص موجود در استاندارد برابر ۱۲۰ هزار کیلومتر مسافت چرخه NEDC گزارش شده است به همین دلیل ابتدا معادله پراکندگی بر حسب زمان نگهداری واکنشگر در اجاق به دست آمده است. مقدار پراکندگی و سایت فعال واکنشگر تازه از صحت سنجی شبیه‌سازی واکنشگر با داده چرخه رانندگی NEDC تهیه شده توسط اپیکو به ترتیب ۱ و ۰,۱۷ به دست آمده است. مقدار پراکندگی برای زمان اجاق به دست آمده ولی مقدار پراکندگی بر حسب کیلومتر در ادامه نیاز می‌شود به همین دلیل یک نکاشت خطی بین زمان ماندگاری در اجاق و کیلومتر معادل به صورت زیر فرض شده است.

$$\frac{t}{\tau} = \frac{x}{X} \quad (۳)$$

<sup>1</sup> Sintering

<sup>2</sup> Dispersion

<sup>3</sup> Fuentes



شکل ۲: اختلاف واکنشگر تازه و فرسوده در مسافت مشابه در چرخه‌های مختلف رانندگی

حال با فرض ادامه دار بودن نرخ آلاینده‌گی تولید شده، بیشترین مسافت‌هایی برای استاندارد یورو ۳، ۴ و ۵ برای چرخه‌های مختلف به دست آمده تا این استانداردها پاس شوند. جدول ۲ این مسافت‌ها را نشان می‌دهد مقادیر این جدول برحسب کیلومتر است.

جدول ۲: مسافت استانداردهای مختلف چرخه‌های رانندگی

چرخه رانندگی	مسافت فرسایش	مسافت معادل یورو ۵	مسافت معادل یورو ۴	مسافت معادل یورو ۳
NEDC	۱۲۰۰۰	۵۲۰۰۰	۵۲۰۰۰	۱۰۴۰۰۰
Wltc	۴۸۰۰۰	۹۶۰۰۰	۹۶۰۰۰	۲۰۰۰۰۰
FTp	۳۲۰۰۰	۹۸۰۰۰	۹۸۰۰۰	۱۲۶۰۰۰
Artemis	۴۸۰۰۰	۸۵۰۰۰	۸۵۰۰۰	۱۶۳۰۰۰
Tehran	۷۴۰۰۰	۷۳۰۰۰	۱۱۸۰۰۰	۱۴۵۰۰۰

## ۵- نتیجه‌گیری

پدیده عمر واکنشگر در تولید آلاینده‌گی از خودرو طی مسافت مشخصی تأثیر زیادی دارد و ندیدن این پدیده موجب می‌شود تا آلاینده‌گی چند برابر کمتر تخمین زده شود. از طرفی برای هر چرخه یک مسافت معادل پیرسازی واکنشگر مطرح شده که زمان مناسب واکنشگر است.

خودروهایی که در سطح شهر درحال تردد هستند بر اساس استاندارد یورو ۳ روانه بازار شده اند به همین دلیل اگر چرخه رانندگی تهران در نظر بگیریم به این نتیجه می‌رسیم که با تعویض واکنشگر در ۷۴ هزار کیلومتر مقدار آلاینده‌گی تولید شده ۸۰ درصد کاهش می‌یابد. به بیان دیگر مسافت ۱۴۵ هزار کیلومتر طی شده با یک واکنشگر با تعویض آن در ۷۴ هزار کیلومتر در فاصله ۱۴۵ هزار کیلومتر کل، از ورود ۲۶۶ کیلوگرم کربن مونواکسید به محیط زیست جلوگیری شده است.

نسوخته صورت گرفته است در این معادله هر متغیر معرفی شده در بازه نقشه موجود خود به ۵ قسمت تقسیم شده و ۶۲۵ حالت مختلف مورد تحلیل قرار گرفته است.

هرچه یک واکنشگر بیشتر مورد استفاده قرار گیرد یا به بیان دیگر درصد تبدیل سه گونه شیمیایی آن به ۱۰۰ نزدیکتر باشد یعنی آن واکنشگر فرسوده تر شده است به همین منظور درصد تبدیل سه گونه شیمیایی به عنوان متغیر هدف انتخاب شده است. از این تحلیل حساسیت صورت گرفته نسبت وزنی ۰٫۲ به ۰٫۸ برای شار و دما به دست آمده است همچنین نسبت وزنی ۰٫۴۴، ۰٫۳۲ و ۰٫۲۴ به ترتیب برای کربن مونواکسید، اکسید ازت و هیدروکربن نسوخته به دست آمده است.

با احتساب این موارد روابطی برای رسیدن به مسافت معادل یا همان مقایسه دو چرخه به دست آمده است. با توجه به در دسترس نداشتن اطلاعات برای صحت سنجی رابطه در ادامه تنها اعتبار سنجی بر رابطه صورت گرفته است. در این راستا نکاتی که باید در بخش اعتبار سنجی رابطه برقرار شود بدین صورت‌اند:

- ۱- رابطه باید بر حسب زمان چرخه، مسافت چرخه، دما و شار باشد.
  - ۲- با قرار دادن چرخه مبنا پاسخ ۱۲۰ هزار کیلومتر شود.
  - ۳- با چند برابر کردن چرخه مبنا پاسخ همچنان ۱۲۰ هزار کیلومتر شود.
  - ۴- در صورت دور درجای موتور (مسافت = ۰) پاسخ غیر صفر شود.
  - ۵- ضریب وزنی ۰٫۲ به ۰٫۸ به ترتیب برای شار و دما برقرار باشد.
  - ۶- ضریب وزنی ۰٫۳۲ به ۰٫۴۴ و ۰٫۲۴ به ترتیب برای نسبت اکسید ازت، نسبت کربن مونواکسید و هیدروکربن نسوخته برقرار باشد.
- رابطه مسافت معادل به دست آمده که تمام شروط قید شده را ارضا می‌کند به صورت رابطه ۵ است.

$$x^f = 1.2 \times 10^5 \times \left[ 1 + \ln \left[ 0.2 \frac{\dot{m}}{\dot{m}_b} + 0.8 \left( \frac{\int T}{\int T_b} - \frac{X}{X_b} \right) \right] \right]^{-1} \quad (5)$$

که در این رابطه :

$$\frac{\dot{m}}{\dot{m}_b} = 0.44 \frac{\int \dot{CO}}{\int \dot{CO}_b} + 0.32 \frac{\int \dot{NOx}}{\int \dot{NOx}_b} + 0.24 \frac{\int \dot{HC}}{\int \dot{HC}_b} \quad (6)$$

پس از حل واکنشگر برای چرخه‌های رانندگی مختلف به سه سوال مطرح شده در ابتدای مقاله پاسخ داده می‌شود. برای بررسی ارزش موضوع عمر واکنشگر بین مقدار آلاینده‌گی به دست آمده در حالت فرسایش واکنشگر و حالت تازه در چرخه‌های رانندگی مختلف مقایسه‌ای صورت گرفته است که نمودار شکل ۲ اختلاف بین آن دو را به خوبی نشان می‌دهد.

## تشکر و قدردانی

نویسندگان این مقاله مراتب تشکر را از شرکت تحقیق، طراحی و تولید موتور ایران خودرو (ایپکو) به خصوص بخش نگاهت و مدیریت موتور آقایان مهندس نیکخواه و علیزاده‌نیا اعلام می‌دارند.

## فهرست علائم

A	سایت فعال
D	پراکندگی
x	مسافت، km
X	مسافت کل چرخه، km
T	دما، K
CO	نرخ کربن مونواکسید، g/s
HC	نرخ هیدروکربن نسوخته، g/s
NO	نرخ اکسید ازت، g/s
f	مسافت معادل
$\tau$	زمان اجاق پیرسازی، hr
b	چرخه مینا، NEDC

## مراجع و منابع

- [1] A. Holmgren, "Catalysts for car exhaust: Oxygen storage in platinum/ceria and mass transfer in monoliths," *Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology*, 1998.
- [2] S. LINDQVIST, "Characterization of Automotive Catalyst Ageing," Master of Science thesis, Department of Chemical and Biological engineering, Chalmers University of Technology, Gothenburg, Sweden, 2014.
- [3] F. Duprat, "Light-off curve of catalytic reaction and kinetics," *Chemical Engineering Science*, Article vol. 57, no. 6, pp. 901-911, 2002.
- [4] M. Ozawa, "Role of cerium-zirconium mixed oxides as catalysts for car pollution: A short review," *Journal of Alloys and Compounds*, Article vol. 275-277, pp. 886-890, 1998.
- [5] P. S. Lambrou, C. N. Costa, S. Y. Christou, and A. M. Efstathiou, "Dynamics of oxygen storage and release on commercial aged Pd-Rh three-way catalysts and their characterization by transient experiments," *Applied Catalysis B: Environmental*, Article vol. 54, no. 4, pp. 237-250, 2004.
- [6] K. Cedrone and W. K. Cheng, "Using valve timing and exhaust back pressure to improve catalyst warm-up time," *SAE Technical Papers*, Conference Paper vol. 11, 2013.

- [7] A. Fathali, F. Wallin, A. Kristoffersson, and M. Laurell, "Thermal and Chemical Deactivation of Three-Way Catalysts: Comparison of Road-, Fuel-Cut and SAI- Aged Catalysts," *SAE Technical Papers*, Conference Paper vol. 2015-April, no. April, 2015.
- [8] C. R. Thomas, J. A. Pihl, M. J. Lance, T. J. Toops, J. E. Parks, and J. Lauterbach, "Effects of four-mode hydrothermal aging on three-way catalysts for passive selective catalytic reduction to control emissions from lean-burn gasoline engine," *Applied Catalysis B: Environmental*, Article pp. 284-294, 2019.
- [9] K. B. B. G.F. Froment, J. De Wilde "Chemical Reactor Analysis and Design," *Wiley, New York*, vol. vol. 2, 1990.
- [10] K. S. M. S. R. V.B. Rewatkar, J.B. Joshi, "Some aspects of solid suspension in mechanically agitated reactors," *AIChE J. 35 (1989) 1577-1580*, 1989.
- [11] O. Levenspiel, "Chemical Reaction Engineering," *John Wiley & Sons*, vol. third ed, 1998.
- [12] P. R. Gunjal and V. V. Ranade, "Chapter 7 - Catalytic Reaction Engineering," in *Industrial Catalytic Processes for Fine and Specialty Chemicals*, S. S. Joshi and V. V. Ranade, Eds. Amsterdam: Elsevier, 2016, pp. 263-314.
- [13] R. E. Hayes, B. Liu, R. Moxom, and M. Votsmeier, "The effect of washcoat geometry on mass transfer in monolith reactors," *Chemical Engineering Science*, vol. 59, no. 15, pp. 3169-3181, 2004/08/01/ 2004.
- [14] J. S. Howitt and T. C. Sekella, "Flow effects in monolithic honeycomb automotive catalytic converters," *SAE Technical Papers*, Conference Paper 1974.
- [15] D. W. Wendland and W. R. Matthes, "Visualization of automotive catalytic converter internal flow," *Visualization of Automotive Catalytic Converter Internal Flows*, 1986.
- [16] M. C. Lai and J. Y. Kim, "Three-dimensional simulations of automotive catalytic converter internal flow," *Three-dimensional Simulations of Automotive Catalytic Converter Internal Flow*, 1991.
- [17] B. H. Ramadan, P. C. Lundberg, and R. P. Richmond, *Characterization of a Catalytic Converter Internal Flow*, 2007.
- [18] G. C. Koltsakis, Z. C. Samaras, H. Echtle, D. Chatterjee, P. Markou, and O. A. Haralampous, *Flow Maldistribution Effects on DPF Performance*, 2009.

- [24] P. Forzatti, Buzzi-Ferraris, G., Morbidelli, M., and Carra, S, "Deactivation of catalysts," *Chemical and Kinetic Aspects. International Chemical Engineering* 24(1): 60-73, 1984.
- [25] D. Trimm, "Deactivation and regeneration," pp 1263-1282, in *Handbook of Heterogeneous Catalysis. VCH, Weinheim, German*, 1997.
- [26] R. Holder, M. Bollig, D. R. Anderson, and J. K. Hochmuth, "A discussion on transport phenomena and three-way kinetics of monolithic converters," *Chemical Engineering Science*, vol. 61, no. 24, pp. 8010-8027, 2006/12/01/ 2006.
- [27] C. H. Bartholomew, *Appl. Catal.*, Article vol. 67, p. 1, 1994.
- [28] G. A. Fuentes, "Catalyst deactivation and steady-state activity: A generalized power-law equation model," *Applied Catalysis*, Article vol. 15, no. 1, pp. 33-40, 1985.
- [19] J. Chen, H. Yang, N. Wang, Z. Ring, and T. Dabros, "Mathematical modeling of monolith catalysts and reactors for gas phase reactions," *Applied Catalysis A: General*, vol. 345, no. 1, pp. 1-11, 2008.
- [20] J. Jirát, M. Kubíček, and M. Marek, "Mathematical modelling of catalytic monolithic reactors with storage of reaction components on the catalyst surface," *Catalysis Today*, vol. 53, no. 4, pp. 583-596, 1999.
- [21] A. Onorati, G. Ferrari, G. D'Errico, and G. Montenegro, "The prediction of 1D unsteady flows in the exhaust system of a S.I. Engine including chemical reactions in the gas and solid phase," *SAE Technical Papers*, 2002.
- [22] C. Bartholomew, "Catalyst deactivation/regeneration," pp 182-316 in *Encyclopedia of Catalysis. Editor Horvath, I. Wiley-Interscience, Hoboken, NJ*, 2003.
- [23] C. Bartholomew, and Farrauto, R. *Fundamentals of Industrial Catalytic Processes., Second Edition. Wiley, Hoboken, NJ*, 2006.



## Investigating the Impact of Driving Cycle on 3-way Catalyst Degradation and Emission Characteristics of ICEV

P. Taherkhani<sup>1</sup>, Sh. Mafi<sup>2</sup>, A. Kakaee<sup>\*3</sup>

<sup>1</sup> MSc Graduate, Automotive Engineering Department, Iran University of Science & Technology, Tehran, Iran, [p\\_taherkhani@auto.iust.ac.ir](mailto:p_taherkhani@auto.iust.ac.ir)

<sup>2</sup> PhD Candidate, Automotive Engineering Department, Iran University of Science & Technology, Tehran, Iran, [S\\_mafi@auto.iust.ac.ir](mailto:S_mafi@auto.iust.ac.ir)

<sup>3</sup> Associate Professor, Automotive Engineering Department, Iran University of Science & Technology, Tehran, Iran, [Kakaee\\_ah@iust.ac.ir](mailto:Kakaee_ah@iust.ac.ir)

\*Corresponding Author

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received: 11 December 2019

Accepted: 18 February 2020

#### Keywords:

3-way Catalyst Converters

Degradation

Vehicle Kinematic Simulation

Driving cycle

Emission

### ABSTRACT

Internal Combustion Engine Vehicles or ICEVs play a major role in air pollution for big cities like Tehran. Catalyst converters manage to contain much of the generated pollution from combustion and are considered as a mandatory part of any vehicle. Manufacturer guidelines clarify a certain mileage for catalyst to be regarded as completely degraded and thus unable to contain harmful gasses from combustion. In this paper we test the theory that catalyst degradation is greatly affected by driving condition by using kinematic simulation of vehicle in different driving cycles. Catalyst degradation parameters are derived for the reference driving cycle (NEDC) and then developed accordingly for other driving conditions. The vehicle model with degradation sub-model is then utilized for investigating different scenarios of replacing old catalyst with a new one. Results clearly support the idea that driving cycles greatly affect the degradation age of 3-way catalysts and vehicle emissions are increased up to 5 times by using catalyst after its age limit. For Tehran driving cycle, 75K kilometers appears to be the aging limit. Authors conclude that local investigation of driving cycles is necessary for finding degradation limits and careful designation of parts replacement plans can help to massively increase air quality in large cities.

