

# MỞ ĐẦU

## 1. Tổng quan

- Môi trường sống của con người đang ngày càng bị ô nhiễm nặng do chính các chất thải từ các hoạt động của con người gây ra, một trong các nguồn chất thải đó là khí thải của các phương tiện giao thông cơ giới. Trong quá trình hoạt động các phương tiện giao thông phát thải vào không khí một khối lượng lớn các loại khói, khí độc như CO, CO<sub>2</sub>, hydrocacbon (HC), NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub>, khói đen, chì và các chất thải dạng hạt khác. Các thành phần chất thải này không những gây tác hại trực tiếp cho sức khỏe con người mà còn phá hủy trái đất.

- Tùy theo loại động cơ và loại nhiên liệu sử dụng mà khối lượng các thành phần chất thải độc hại chiếm các tỷ lệ khác nhau. Theo số liệu thống kê ở Mỹ, các chất ô nhiễm phát thải từ các phương tiện này chiếm 40÷50% tổng hàm lượng HC, 50% tổng hàm lượng NO<sub>x</sub> và 80÷90% tổng hàm lượng CO ở khu vực thành phố. Ở các nước phát triển khác như Châu Âu và Nhật Bản cũng xảy ra vấn đề tương tự.

- Để giảm thiểu các thành phần độc hại trên, các nước trên thế giới đã đưa ra các tiêu chuẩn khí thải, theo đó các phương tiện chỉ được phép lưu hành khi đạt các tiêu chuẩn khí thải nói trên. Hiện nay có ba tiêu chuẩn phổ biến mà các nước đang áp dụng là các tiêu chuẩn của Mỹ (TIER), Nhật (JP) và Châu Âu (EURO). Để đáp ứng các tiêu chuẩn khí thải nói trên, giải pháp hiệu quả là sử dụng bộ xúc tác xử lý khí thải.

## 2. Mục tiêu nghiên cứu

- Đề tài phân tích đánh giá các biện pháp giảm thải ô nhiễm môi trường do khí thải của động cơ.

- Mô phỏng quá trình hoạt động của bộ xúc tác 3 thành phần

- Đánh giá hiệu quả của bộ xúc tác 3 thành phần, đưa ra các giải pháp tối ưu để tính toán thiết kế bộ xúc tác.

## 3. Đối tượng và phạm vi nghiên cứu

- Nghiên cứu về bộ xúc tác 3 thành phần được lắp đặt trên xe Liberty 125 cm<sup>3</sup>

- Nghiên cứu lý thuyết về vật liệu xúc tác và cơ chế phản ứng xúc tác.

- Nghiên cứu hiệu quả chuyển đổi của bộ xúc tác 3 thành phần.

## 4. Phương pháp nghiên cứu

- Nghiên cứu tổng quan các nghiên cứu gần đây liên quan đến bộ chuyển đổi xúc tác 3 thành phần ở trên thế giới nhằm làm cơ sở cho việc đưa ra định hướng và nội dung chi tiết của nghiên cứu
- Nghiên cứu lý thuyết và tính toán đối với mẫu xúc tác
- Nghiên cứu mô phỏng trên phần mềm AVL để đánh giá hiệu quả chuyển đổi của bộ xúc tác 3 thành phần.

## **5. Ý nghĩa khoa học và thực tiễn**

- Đề tài góp phần làm sáng tỏ cơ chế phản ứng trong bộ chuyển đổi xúc tác 3 thành phần làm cơ sở cho việc hướng tới thiết kế chế tạo trong nước.

- Đánh giá hiệu quả bộ xúc tác 3 thành phần có ý nghĩa đối với nhà sản xuất ô tô, xe máy trong việc lựa chọn bộ xúc tác phù hợp và có ý nghĩa đối với nhà nước trong việc đưa ra lộ trình nâng cao chất lượng nhiên liệu kết hợp với nâng cao chất lượng khí thải của phương tiện sử dụng động cơ xăng.

# CHƯƠNG I TỔNG QUAN ĐỀ TÀI

## 1.1 Hiện trạng ô nhiễm môi trường từ phương tiện giao thông

### 1.1.1. Đặc điểm phát thải của động cơ đốt trong

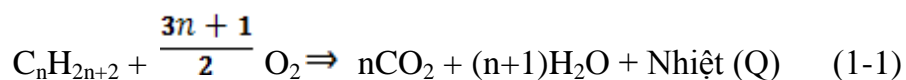
Các thành phần độc hại phát ra từ động cơ có thể từ 3 nguồn:

\_ Khí thải trên đường ống xả: kể đến những khí được phát sinh trong quá trình cháy nhiên liệu trong động cơ và thải ra ngoài trong đường ống xả. Khí thải bao gồm những thành phần chính là Nitơ ( $N_2$ ) và hơi nước chiếm khoảng 83%, các khí còn lại là oxit cacbon (CO), cacbonic ( $CO_2$ ), cacbua hydro (HC), và các loại oxit nito ( $NO_x$ ). Chỉ có thể được kể đến, thành phần này phụ thuộc vào loại nhiên liệu xăng được sử dụng.

\_ Các khí rò rỉ: bao gồm những khí rò rỉ qua khe hở giữa pit tông và xi lanh, chủ yếu là  $N_2$  và  $O_2$  chiếm tới 90% phần còn lại là  $CO_2$ , HC, hơi nước và một hàm lượng rất nhỏ CO và  $NO_x$ .

\_ Các khí bay hơi: Hơi xăng HC bay hơi từ thùng nhiên liệu và bộ chế hòa khí.

Trong các thành phần khí thải ô tô thì như đã nói ở trên, CO, HC,  $NO_x$  và muội than là những chất nguy hại. Sự hình thành các chất độc hại này liên quan đến quá trình cháy và đặc điểm của nhiên liệu sử dụng bởi vì quá trình cháy trong động cơ đốt trong là quá trình oxi hóa nhiên liệu, giải phóng nhiệt năng và quá trình này diễn ra trong buồng cháy động cơ theo những cơ chế hết sức phức tạp và chịu ảnh hưởng của nhiều thông số như thành phần giữa không khí và nhiên liệu, điều kiện cháy v.v... ở điều kiện lý tưởng, sự đốt cháy hoàn toàn của nhiên liệu hydrocarbon với oxy trong không khí sẽ sinh ra sản phẩm cháy không độc hại như là  $CO_2$ ,  $H_2O$  thể hiện trong phương trình cháy dưới đây:



Tuy nhiên, trong động cơ trạng thái cân bằng hóa học lý tưởng đối với cháy hoàn toàn có thể nói là khó xảy ra, bởi vì thời gian cho quá trình oxi hóa bị giới hạn. Thêm vào đó là sự thiếu đồng nhất ở trạng thái hơi của nhiên liệu trong không khí và sự thay đổi nhiệt độ rất nhanh của quá trình cháy không hoàn toàn của nhiên liệu sinh ra các chất độc hại CO, HC,  $NO_x$  trong khí thải cùng với những sản phẩm thông thường của quá trình cháy hoàn toàn. Nồng độ các thành phần trong khí thải thay đổi tùy thuộc vào kiểu loại động cơ và đặc điểm là phụ thuộc vào điều kiện vận hành của động cơ.

Sự tạo thành CO là sự đốt cháy không hoàn toàn của nhiên liệu trong xy lanh do thiếu không khí. Hàm lượng CO tăng khi hệ số dư lượng không khí  $\lambda$  giảm <1. Nồng độ CO cao hơn với hỗn hợp giàu nhiên liệu hơn. Một nguyên nhân nữa

là sự hòa trộn không đều giữa nhiên liệu và không khí hoặc nhiên liệu không hoàn toàn ở trạng thái hơi. Do vậy, mặc dù  $\lambda$  chung có thể  $> 1$  nhưng vẫn có những khu vực cháy trong xilanh thiếu không khí, dẫn đến sự tạo thành CO.

Chất thải hydrocacbon chưa cháy HC cũng là do sự cháy không hoàn toàn của nhiên liệu trong xilanh động cơ gây ra. Nguồn chính của khí thải HC là do nhiên liệu thoát khỏi sự cháy trong buồng cháy của động cơ do quá trình chuyển tiếp nhiên liệu nạp, do các khe hở, do sự nén hỗn hợp chưa cháy vào các khe giữa đầu pít tông và xilanh trong quá trình nén khi áp suất cao và sự giải phóng hỗn hợp này vào hỗn hợp đã cháy trong xilanh ở thời kỳ giãn nở khi áp suất giảm. Màng dầu bôi trơn cũng là nguyên nhân gây ra HC trong khí thải, màng dầu hấp thụ HC trong quá trình nén và giải phóng HC vào khí cháy trong quá trình giãn nở. Một phần Hydrocacbon này được oxi hóa khi được trộn với khí đã cháy trong quá trình giãn nở và quá trình xả, phần còn lại thải ra ngoài cùng với khí thải nên gây ra sự phát thải HC. Mức độ oxi hóa HC phụ thuộc vào điều kiện và chế độ vận hành của động cơ như là tỷ số giữa nhiên liệu và không khí, tốc độ động cơ, tải, góc đánh lửa... Sự đánh lửa muộn thích hợp để oxi hóa HC sau quá trình cháy. Nguồn phát sinh khác của HC là sự cháy không hoàn toàn trong một phần của chu kỳ vận hành của động cơ (hoặc là đốt cháy từng phần hoặc hiện tượng bỏ lửa hoàn toàn) xảy ra khi chất lượng đốt cháy kém. Hàm lượng HC chưa cháy trong khí thải chủ yếu phụ thuộc vào tỷ lệ không khí và nhiên liệu. Nồng độ của chúng tăng khi hỗn hợp đậm hơn, đặc biệt là đối với  $\lambda < 1$ . Đối với hỗn hợp quá nghèo khí xả HC cũng tăng do đốt cháy không hoàn toàn hoặc hiện tượng bỏ lửa trong một phần của các chu kỳ vận hành động cơ.

Các chất oxit nitơ NO, dioxit nitơ NO<sub>2</sub> được gọi chung dưới tên gọi NO<sub>x</sub> trong đó NO chiếm đa phần, có thể tới 90 ÷ 98%. Khí thải NO<sub>x</sub> được hình thành ở nhiệt độ cháy cao. Trong buồng cháy động cơ, dưới áp suất cao, bề dày màng lửa không đáng kể và tồn tại trong thời gian ngắn, do đó đại bộ phận NO<sub>x</sub> hình thành phía sau màng lửa, tức là sau khi hỗn hợp bị đốt cháy. Nhân tố chính ảnh hưởng tới sự hình thành NO<sub>x</sub> là nhiệt độ, oxy và thời gian. Nhiệt độ cao, oxy nhiều và thời gian dài thì NO<sub>x</sub> sẽ cao, tức là khi động cơ chạy toàn tải, tốc độ thấp và  $\lambda = 1.05 \div 1.1$  thì NO<sub>x</sub> lớn.

### ***1.1.2. Tình hình ô nhiễm môi trường do khí thải động cơ trên thế giới và ở Việt Nam***

Môi trường sống của nhân loại đang ngày càng bị ô nhiễm nặng do chính các chất thải từ các hoạt động của con người gây ra, mà một trong các nguồn chất thải đó là khí thải của các phương tiện giao thông cơ giới. Trong quá trình hoạt động các phương tiện giao thông phát thải vào không khí một khối lượng lớn các

loại khói, khí độc như CO, CO<sub>2</sub>, hydrocacbon (HC), NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub>, khói đen, chì và các chất thải dạng hạt khác. Các thành phần chất thải này không những gây tác hại trực tiếp cho sức khỏe con người mà về lâu về dài còn phá hoại cả thế giới sinh vật đang phá hoại cả thế giới sinh vật đang nuôi sống con người.

Tùy theo loại động cơ và loại nhiên liệu sử dụng mà khối lượng các thành phần chất thải độc hại chiếm các tỷ lệ khác nhau. Theo số liệu thống kê ở Mỹ, các chất ô nhiễm phát thải từ các phương tiện này chiếm 40 ÷ 50% tổng hàm lượng HC, 50% tổng hàm lượng NO<sub>x</sub> và 80 ÷ 90% tổng hàm lượng CO ở khu vực thành phố [1]. Ở các nước phát triển khác như Châu Âu và Nhật Bản cũng xảy ra vấn đề tương tự.

Trong những năm gần đây cùng với sự phát triển của kinh tế thì tình hình ô nhiễm môi trường cũng ngày càng trầm trọng do số lượng động cơ sử dụng ngày càng nhiều. Trung bình hàng năm thế giới sản xuất thêm 40 triệu chiếc động cơ, mức độ phát triển ô tô, xe máy ngày càng mạnh, đặc biệt là tại các khu đô thị của Châu Á. Không kiểm soát khí thải, các loại phương tiện này thải ra ngoài môi trường một lượng đáng kể các chất hydroxit cacbon (HC), oxit cacbon (CO) và khói bụi. Các chất này góp phần quan trọng gây ô nhiễm không khí tại rất nhiều nước ở Châu Á. Các nước ở Châu Á đang chú tâm đến các vấn đề ô nhiễm do các phương tiện gây ra.

Tại Việt Nam, tình trạng ô nhiễm môi trường do khí thải động cơ đã đến mức đáng lo ngại. Theo số liệu cập nhật năm 2013, số lượng phương tiện giao thông, chỉ tính phương tiện giao thông cơ giới đường bộ ở Việt Nam đã là trên 39.000.000 xe gắn máy, trên 2.500.000 xe ô tô các loại và số lượng phương tiện giao thông này vẫn đang gia tăng một cách nhanh chóng, đặc biệt ở hai đô thị lớn là Hà Nội và thành phố Hồ Chí Minh [2]. Nếu tính bình quân một ô tô có dung tích là 2.5 lít, và một xe máy là 0.1 lít thì 25 xe máy sẽ tương đương một ô tô. Như vậy 39 triệu xe máy cũng sẽ thải ra một lượng khí thải bằng 1.6 triệu ô tô. Chưa kể trong đô thị, xe máy sẽ có thời gian lăn bánh nhiều hơn vì là phương tiện cơ động của người dân.

Hình ảnh các xe máy cũ nát, xả khói đen sì, mù mịt không phải là cảnh khó gặp tại các đô thị hiện nay. Trong khi đó, lượng khí thải này chưa hề được kiểm soát, điều này dẫn tới chất lượng không khí ngày càng giảm.

Các biện pháp giảm ô nhiễm khí thải động cơ đốt trong

Các biện pháp giảm ô nhiễm khí thải.

Nhìn chung các biện pháp kiểm soát lượng khí thải độc hại có thể chia thành ba nhóm chính:

\_ Nhóm thứ nhất bao gồm các biện pháp giảm tối thiểu nồng độ độc hại bằng cách tối ưu hóa chất lượng đốt cháy thông qua việc tối ưu hóa kết cấu động cơ.

\_ Nhóm thứ hai bao gồm các biện pháp xử lý khí thải để chuyển đổi khí thải thành khí trơ trước khi thải ra ngoài môi trường bằng cách sử dụng các phương pháp xử lý xúc tác.

\_ Nhóm thứ ba bao gồm các biện pháp liên quan đến cách thức sử dụng nhiên liệu truyền thống và sử dụng nhiên liệu thay thế.

## ***1.2. Các biện pháp giảm ô nhiễm từ khí thải động cơ xăng***

### ***1.2.1. Giảm thành phần độc hại khí thải nhờ tối ưu hóa thiết kế động cơ***

#### **a) Kiểm soát chính xác tỷ lệ giữa không khí và nhiên liệu trong động cơ.**

Tỷ lệ giữa không khí và nhiên liệu có ảnh hưởng lớn đối với khí xả trong động cơ xăng, hỗn hợp đậm (hệ số dư lượng không khí  $\lambda < 1$ ) sẽ gây lên nồng độ CO và HC cao hơn. Ngày nay, trong động cơ phun xăng sử dụng hệ thống điều khiển điện tử, tỷ lệ giữa không khí và nhiên liệu được điều khiển gần với chế độ lý tưởng trong điều kiện vận hành ổn định nên nồng độ độc hại trong khí thải ít hơn và các tính năng của động cơ tốt hơn các động cơ dung bộ chế hòa khí thông thường. Tuy nhiên, mức độ điều khiển chính xác hệ số dư lượng không khí  $\lambda$  thường gặp khó khăn do sự chênh lệch về tỷ lệ hòa trộn giữa không khí và nhiên liệu giữa các xilanh, đặc biệt là trong giai đoạn vận hành chuyển tiếp. Để khắc phục những vấn đề này, trong một số động cơ, tỷ lệ giữa không khí và nhiên liệu được điều khiển hoàn toàn độc lập trong mỗi xilanh của động cơ, thay thế hệ thống phun xăng đa điểm cho phun xăng đơn điểm để có  $\lambda$  đồng đều giữa các xilanh hoặc bằng kỹ thuật điều khiển thích ứng tức thời theo thời gian.

Các động cơ sử dụng hỗn hợp nghèo có thể đạt được cả yêu cầu về nồng độ độc hại thấp và suất tiêu hao nhiên liệu thấp. Tuy nhiên, do giới hạn cháy của xăng với không khí rất hẹp nên để mở rộng phạm vi này, người ta thiết kế động cơ sử dụng đường nạp theo kiểu tạo xoáy lốc, buồng cháy có hình dạng đặc biệt để tạo ra sự xoáy lốc trong xi lanh động cơ, do vậy cải thiện được tốc độ cháy và tăng được giới hạn cháy nghèo. Các nghiên cứu cho thấy đốt cháy hỗn hợp phân lớp cho phép cải thiện được nồng độ khí xả độc hại cũng như suất tiêu hao nhiên liệu và tăng giới hạn đốt cháy nghèo. Tuy nhiên, khi sử dụng hỗn hợp nghèo thì khả năng ổn định cháy thấp và hiệu quả chung của bộ xúc tác ba chức năng không cao.

Hỗn hợp không đồng nhất cũng gây nên lượng khí thải CO, HC cao bởi vì nó gây ra sự sai lệch cục bộ giữa các xilanh về tỷ lệ giữa không khí và nhiên liệu

tại thời điểm đốt cháy. Việc giảm bớt nhiên liệu ở dạng hạt vào trong xilanh của động cơ bằng cách phân tử hóa nhiên liệu và tăng bay hơi của nhiên liệu tại cửa nạp động cơ để đạt được mức độ đồng nhất cao hơn, sẽ làm giảm đáng kể lượng CO, HC. Ở giai đoạn khởi động, việc sấy nóng nhanh buồng đốt nhờ sấy nóng nước làm mát cũng làm giảm nồng độ khí thải độc hại.

Nhìn chung, việc kiểm soát hỗn hợp để đạt được hỗn hợp ở điều kiện lý tưởng, hỗn hợp nghèo và hỗn hợp đồng nhất là những nhân tố quyết định để giảm lượng khí thải độc hại ngay từ bên trong động cơ. Tuy nhiên, điều này chỉ có thể đạt được và chỉ có thể áp dụng được ở điều kiện vận hành ổn định. Trong giai đoạn khởi động và giai đoạn chuyển tiếp tăng tải hoặc tăng tốc phải cung cấp hỗn hợp giàu nhiên liệu để bù vào phần nhiên liệu ngưng tụ trên thành xilanh động cơ để duy trì khả năng làm việc của động cơ theo yêu cầu, điều này sẽ làm tăng lượng khí thải CO và HC mà không thể tránh khỏi được.

### **b) Điều khiển sự đánh lửa muộn trong động cơ**

Phương pháp này dựa trên lý thuyết động cơ đốt trong và việc phân tích chu trình nhiệt động động cơ. Trong động cơ đốt trong, thời điểm đánh lửa tốt nhất trong động cơ xăng là thời điểm đánh lửa hoặc phun nhiên liệu mà động cơ phát ra công suất cao và suất tiêu hao nhiên liệu thấp, làm việc ổn định. Đánh lửa muộn sẽ dẫn tới công suất động cơ giảm, suất tiêu hao nhiên liệu tăng và sự mất nhiệt cho khí xả tăng. Đánh lửa muộn sẽ làm chậm quá trình đốt cháy trong xi lanh, làm quá trình cháy kéo dài sang hành trình giãn nở. Do vậy, nhiệt năng chuyển hóa thành cơ năng ít hơn trong khi nhiệt thải ra khí xả nhiều lên. Nguyên lý này có thể được áp dụng để tăng năng lượng khí xả, rút ngắn thời gian chạy ấm máy và khởi động bộ xử lý xúc tác trong giai đoạn khởi động lạnh và chạy ấm máy để giảm CO, HC, NO<sub>x</sub> bằng cách điều khiển mức độ và thời gian đánh lửa muộn trong giai đoạn này.

Phương pháp này đã được nghiên cứu trên động cơ phun xăng điều khiển điện tử [3, 4] cho thấy HC, CO, NO<sub>x</sub> trước bộ xúc tác đã giảm đáng kể và thời gian khởi động bộ xúc tác cũng giảm đáng kể. Kết quả là lượng khí thải độc hại ra khỏi ống thải động cơ giảm đi rõ rệt.

### **c) Luân hồi khí xả**

Thực chất của phương pháp này là đưa một phần sản phẩm cháy quay trở lại buồng đốt với tỷ lệ từ 5 ÷ 20% so với hỗn hợp nạp mới. Do hòa trộn với lượng khí đã cháy có nhiệt độ cao này nên nhiệt độ môi chất trong quá trình nén tăng, đảm bảo hỗn hợp có thể cháy dễ dàng. Mặt khác nồng độ oxy khi đó giảm và

nhệt độ trong quá trình cháy nhỏ nên sự tạo thành khí  $\text{NO}_x$  giảm đi rõ rệt. Trong động cơ xăng thường chỉ áp dụng với dạng đốt cháy hỗn hợp phân lớp không chỉ cải thiện mức độ khí xả độc hại mà còn cải thiện được cả tính kinh tế nhiên liệu. Người ta chia phương pháp luân hồi khí xả thành hai loại là luân hồi nội tại và luân hồi bên ngoài.

Luân hồi nội tại dựa trên cơ sở góc trùng điệp của xupap nạp và xupap thải. Trong giai đoạn trùng điệp, do chênh lệch áp suất, một phần sản vật cháy đi vào đường nạp sau đó trong quá trình nạp quay trở lại xilanh. Biện pháp này không những giảm  $\text{NO}_x$  mà còn giảm được cả HC vì các sản vật luân hồi sẽ chiếm các vị trí sát vách trước tiên, do đó giảm lượng khí nạp mới ở sát vách.

Luân hồi bên ngoài là phương pháp trích một phần khí thải từ đường thải quay trở lại đường nạp vào động cơ và điều chỉnh lượng khí thải luân hồi bằng van tiết lưu có cơ cấu điều khiển.

#### **d) Xử lý xúc tác trong xi lanh**

Một phương pháp khác làm giảm hàm lượng khí xả độc hại là phủ một lớp xúc tác lên bề mặt buồng cháy nhằm mục đích tăng nhiệt độ thành buồng cháy đặc biệt là nhiệt độ thành tại các khe hẹp để giảm hiện tượng dập tắt màng lửa và do vậy cải thiện mức độ oxy hóa HC trong các khe hẹp. Tuy nhiên, với phương pháp này lượng khí thải độc hại giảm không nhiều, với những vật liệu quý làm chất xúc tác (23 gam với tỷ lệ 9:1 Pt-Rh) có thể giảm được 20% lượng HC [3].

Tóm lại, ngày nay với công nghệ tiên tiến được ứng dụng trong ngành công nghiệp chế tạo ô tô, nhiều tiến bộ khoa học đã được đưa vào ứng dụng trong động cơ, đặc biệt với việc tối ưu hóa buồng cháy, điều khiển chính xác thời điểm đánh lửa và tỷ lệ giữa không khí và nhiên liệu khi sử dụng hệ thống điều khiển điện tử đã giảm được đáng kể thành phần độc hại. Công nghệ chế tạo động cơ đã đạt tới đỉnh cao, tuy nhiên, nồng độ khí thải độc hại vẫn không giảm được đến mức quy định. Do đó cần phải sử dụng biện pháp xử lý khí thải để giảm hơn nữa hàm lượng độc hại của chúng.

### ***1.2.2. Giảm thành phần độc hại bằng biện pháp xử lý khí thải***

#### **a) Xử lý bằng bộ xử lý xúc tác ba thành phần**

Mục đích là chuyển khí thải CO, HC,  $\text{NO}_x$  thành các khí không độc hại bằng cách oxy hóa CO, HC, và khử khí  $\text{NO}_x$  trong hệ thống xử lý dung chất xúc tác. Trong đó CO, HC chỉ có thể oxy hóa ở nhiệt độ tương đối cao với thời gian đủ để các phản ứng oxy hóa diễn ra hoàn toàn. Người ta có thể đưa thêm một lượng không khí vào để oxy hóa triệt để CO, HC sau khi đã khử  $\text{NO}_x$ .



Trong hệ thống thải thông thường, nhiệt độ khí xả không đủ cao để chuyển đổi phần lớn CO, HC, NO<sub>x</sub>. Để thực hiện sự chuyển đổi này, hệ thống thải được trang bị các thiết bị đặc biệt được gọi là bộ xử lý xúc tác có tác dụng tăng cường các quá trình oxy hóa và khử các thành phần độc hại [3].

### **b) Hỗ trợ phản ứng trên đường thải**

Phương pháp này là đốt cháy trực tiếp khí xả CO và HC trong hệ thống thải bằng cách nào đó để giảm trực tiếp lượng khí xả độc hại và đốt nóng nhanh bộ xử lý xúc tác nhờ nhiệt phát sinh trong quá trình oxy hóa HC và CO để bộ xúc tác nhanh đạt tới nhiệt độ làm việc hiệu quả. Một số kỹ thuật để thực hiện phương pháp này như sau:

#### **Phun không khí phụ trợ**

Lượng CO và HC được hình thành từ quá trình cháy có thể tiếp tục được oxy hóa trong hệ thống thải ở nhiệt độ cao khi có oxy dư thừa. Tại cửa xả nơi mà nhiệt độ khí xả vẫn cao (>800°C) thì tới 40% HC ra khỏi xi lanh động cơ được oxy hóa, nhiệt độ khí xả càng cao thì sự oxy hóa HC càng lớn khi có oxy. Phương pháp này không giảm được thành phần NO<sub>x</sub>. Tại giai đoạn khởi động lạnh, động cơ được cung cấp hỗn hợp giàu để cải thiện chế độ vận hành, do đó, nồng độ HC và CO trong khí xả rất cao trong khi nồng độ oxy tương đối thấp. Tận dụng nhiệt độ cao tại cửa xả, sự oxy hóa HC tại đây có thể được xúc tiến bằng cách cung cấp thêm một lượng không khí vào. Điều này sẽ làm giảm CO và HC, tiếp đó là sự sinh nhiệt để rút ngắn thời gian sấy nóng bộ xử lý xúc tác.

Phương pháp này giảm đáng kể CO và HC trong giai đoạn khởi động và có thể rút ngắn thời gian sấy nóng bộ xử lý xúc tác, nhưng hiệu quả giảm lượng khí xả độc hại là không lớn, sự phát nhiệt từ quá trình oxy hóa của CO và HC không cao. Nếu lượng không khí được phun vào quá lớn có thể dẫn tới giảm nhiệt độ khí xả và gây phản tác dụng. Để điều chỉnh chính xác lượng khí bổ sung, yêu cầu thiết bị điều khiển khá phức tạp vì vậy việc áp dụng trên xe gặp nhiều khó khăn.

#### **Đốt cháy cưỡng bức khí thải**

Mục đích của phương pháp này là sinh nhiệt để tăng nhiệt cho bộ xúc tác bằng cách cho động cơ khởi động và chạy ầm máy với hỗn hợp giàu, sau đó đốt tiếp khí thải với một hàm lượng khí bổ sung thêm vào phía trước bộ xử lý xúc tác.

Hệ thống đốt khí thải được thiết lập bao gồm buồng cháy được bố trí ngay trước bộ xử lý xúc tác cùng với thiết bị đánh lửa. Hệ thống hoạt động liên quan đến sự khởi động động cơ với một hỗn hợp rất giàu ( $\lambda < 1$ ). Sau đó HC trong khí thải được đốt cháy tiếp trong buồng đốt với sự cấp thêm không khí.

Sau khi bị đốt cháy cưỡng bức, khí cháy trên đường ống xả được đưa tới bộ xử lý xúc tác. Phương pháp này có thể cung cấp nguồn nhiệt có công suất tới 15 kW để sấy nóng bộ xử lý xúc tác và rút ngắn thời gian khởi động bộ xử lý. Tuy nhiên, phương pháp này gặp phải một số vấn đề như là tính phức tạp của hệ thống, sự tạo muối do hỗn hợp giàu dẫn tới tắc nghẽn trong bộ xử lý và trong buồng đốt. Hơn nữa, bộ xử lý xúc tác có thể được hâm nóng chậm khi động cơ chạy không tải vì lúc đó dòng khí thải có lưu lượng thấp, sự bỏ lửa (không cháy) trong khoảng thời gian ngắn cũng gây ra sự phát thải CO và HC cao nghiêm trọng.

### **c) Giữ nhiệt trên đường thải**

Kỹ thuật này bao gồm các biện pháp để giảm sự mất mát nhiệt của khí thải trước khi đưa vào bộ xử lý xúc tác để cải thiện quá trình hâm nóng bộ xử lý xúc tác để nó nhanh đạt đến nhiệt độ làm việc hiệu quả.

Sử dụng bộ ống góp hấp thụ nhiệt thấp là một trong những cách giảm mất mát nhiệt. Kỹ thuật này gồm giảm khối lượng hệ thống thải, giảm diện tích tiếp xúc của ống thải với khí xả và sử dụng những vật liệu cách nhiệt tốt. Phương pháp này rất đơn giản nhưng sự truyền nhiệt từ đường ống xả ra môi trường vẫn tương đối cao.

Một biện pháp khác để ngăn ngừa sự mất mát nhiệt khí xả là sử dụng bộ ống góp hai vách, một lớp không khí và một lớp cách nhiệt. Biện pháp này làm tăng đáng kể nhiệt độ khí thải tại cửa vào của bộ xử lý xúc tác và rút ngắn thời gian khởi động bộ xử lý tới khoảng 35 giây và cho phép bộ xử lý có thể bố trí xa cửa thải. Tuy nhiên, nếu hệ thống đảm bảo được nhiệt độ khí thải tại cửa vào của bộ xử lý cao để rút ngắn thời gian đạt đến chế độ làm việc hiệu quả của bộ xử lý trong giai đoạn chạy ấm máy thì sẽ làm cho bộ xử lý tiếp xúc với trường nhiệt độ rất cao tại chế độ vận hành toàn tải của động cơ, điều này sẽ làm giảm tuổi thọ của thiết bị xử lý xúc tác.

Gắn bộ xử lý xúc tác ngay sau cửa xả cũng là một cách rất tốt để tận dụng năng lượng khí xả cho mục đích trên. Các nghiên cứu cho thấy phương pháp này có thể rút ngắn thời gian để bộ xử lý xúc tác đạt đến chế độ làm việc hiệu quả đến khoảng 20 giây và khí xả độc hại trong giai đoạn khởi động lạnh giảm đáng kể. Tuy nhiên, dưới chế độ vận hành toàn tải khi đó nhiệt độ khí thải lớn sẽ ảnh hưởng trực tiếp đến tuổi bền của bộ xử lý. Khi đó chúng ta phải sử dụng bộ xử lý có vật liệu xúc tác có tuổi bền cao, chịu được nhiệt độ cao. Điều này có thể không đáp ứng được yêu cầu về tính kinh tế.

Một cách nữa là lưu giữ khí thải lâu ở trạng thái nhiệt độ cao để kéo dài thời gian oxy hóa các thành phần độc hại như HC và CO. Trong trường hợp này, buồng phản ứng phải đủ lớn, được cách nhiệt và phải bố trí ngay sau cửa xả nhằm đảm bảo nhiệt độ  $T \geq 1000\text{K}$  cho quá trình oxy hóa.

#### **d) Dùng nhiên liệu thay thế**

Nhiều phương pháp giảm hàm lượng khí xả độc hại đã được nghiên cứu và áp dụng như đã giới thiệu ở trên. Tuy nhiên các phương pháp này chỉ hiệu quả ở chế độ ấm máy hoàn toàn, ở chế độ khởi động lạnh và chạy ấm máy hàm lượng độc hại còn rất cao làm cho hàm lượng độc hại chung không thể giảm đến mức yêu cầu. Chính vì vậy phương pháp thay đổi cách thức sử dụng nhiên liệu và dung nguồn nhiên liệu mới thay thế, sạch, rẻ hơn cho các phương tiện sẽ là phương án hữu hiệu trong tương lai. Nhiên liệu thay thế được chia thành các nhóm sau:

- Nhiên liệu cồn Methanol và cồn Ethanol.
- Nhiên liệu khí thiên nhiên nén (CNG) và khí thiên nhiên hóa lỏng (LNG).
- Khí dầu mỏ hóa lỏng (LPG)
- Nhiên liệu khí hydro ( $\text{H}_2$ )
- Nhiên liệu giàu Hydro: Hỗn hợp của nhiên liệu hóa thạch với hydro.

Nhiên liệu khí có nguồn gốc hóa thạch có giá thành rẻ hơn xăng và có tỷ lệ H/C lớn hơn nên khi cháy thải ra ít CO và  $\text{CO}_2$  hơn. Thêm nữa nhiên liệu này không chứa benzene và các thành phần cacbuahydro khác nên sạch hơn xăng. Nhiên liệu này có khả năng tạo hòa khí tốt, có tính chống kích nổ cao, khả năng cháy với hỗn hợp nghèo hơn hẳn nhiên liệu xăng cho nên lượng khí thải độc hại thấp hơn nhiều, có thể giảm 20% lượng  $\text{CO}_2$  so với dung nhiên liệu xăng.

Hiện nay trên thế giới đang có hơn 1.2 triệu xe sử dụng nhiên liệu khí thiên nhiên nén (CNG) và gần 1.4 phương tiện sử dụng khí dầu mỏ hóa lỏng (LPG) chủ yếu ở Argentina, Italy, Canada, Mỹ, Nhật Bản. Không chỉ ở các nước phát triển mà các nước đang phát triển cũng rất quan tâm đến nguồn nhiên liệu sạch này. Ở Việt Nam sử dụng nguồn nhiên liệu sạch cũng là một vấn đề được nhà nước và chính phủ quan tâm và nhất là khi ngành khí công nghiệp của nước ta rất phát triển và đến nay đã có nhiều chương trình chạy thử xe dung nhiên liệu khí. Tuy nhiên do nhiệt trị mole thấp hơn xăng nên công suất động cơ sẽ thấp hơn nếu cùng kích thước.

Nhiên liệu cồn Methanol và cồn Ethanol cũng đã được sử dụng làm nhiên liệu thay thế và phụ gia nhiên liệu với mục đích giảm chi phí, giảm thành phần

độc hại khí xả và tăng trị số octan nhiên liệu trong động cơ xăng. Tuy nhiên khi chuyển động cơ xăng sang sử dụng loại nhiên liệu này thì công suất giảm. Thêm nữa, loại nhiên liệu này thường chỉ sẵn có với mức giá chấp nhận được ở các nước công nghiệp và công nghiệp mía đường phát triển.

### Nhiên liệu Hydro

Bên cạnh các loại nhiên liệu thay thế nói trên, hydro từ lâu đã được xem như là một loại nhiên liệu mong muốn cho động cơ đốt trong. Khác với các loại nhiên liệu truyền thống, đây là nguồn nhiên liệu có thể tái tạo và có thể sản xuất từ nguồn nước vô tận và có khả năng sử dụng cho cả động cơ xăng và động cơ diesel. Hydro khi phản ứng với oxy tạo ra sản phẩm sạch, chỉ có nước và không có thành phần ô nhiễm nào, kể cả CO<sub>2</sub> nên không gây ô nhiễm môi trường và không gây hiệu ứng nhà kính như khi sử dụng các loại nhiên liệu hóa thạch. Thêm nữa, nhiên liệu này có ưu điểm là cháy nhanh, trị số octan cao, chống kích nổ tốt nên cho phép động cơ có thể hoạt động cơ có thể làm việc ở tốc độ rất cao, tỷ số nén lớn nhờ đó mà dễ dàng tăng công suất động cơ. Mặc dù vậy nhiên liệu hydro cũng có một số nhược điểm so với nhiên liệu xăng và diesel đó là nhiệt trị mole rất thấp nên nếu không thay đổi kết cấu động cơ khi chuyển từ động cơ chạy xăng hoặc diesel sang động cơ chạy hoàn toàn bằng hydro thì công suất động cơ sẽ bị giảm nhiều. Thêm nữa, việc sản xuất, vận chuyển và tích trữ bảo quản nhiên liệu hydro đủ để thay thế hoàn toàn xăng khá khó khăn và tốn kém do nhiên liệu có tỷ trọng rất thấp.

### Nhiên liệu giàu Hydro

Chính vì một số nhược điểm của nhiên liệu hydro trong việc thay thế hoàn toàn nhiên liệu xăng như đã nói trên nên nhiều nhà nghiên cứu quan tâm đến việc sử dụng hydro như một thành phần phụ gia cho nhiên liệu truyền thống. Với phương pháp này, hydro chỉ được cấp một tỷ lệ nào đó vào trong động cơ để hòa trộn với nhiên liệu chính để tạo ra hỗn hợp nhiên liệu giàu hydro (có hydro ở trạng thái tự do trong hỗn hợp). Nhờ đặc tính cháy nhanh, hydro sẽ giúp đốt cháy hỗn hợp nhiên liệu chính tốt hơn nên giảm được thành phần độc hại khí thải, mở rộng giới hạn cháy và tăng tính chống kích nổ cho động cơ trong khi không thay đổi kết cấu động cơ so với khi dùng xăng hoặc diesel. Vấn đề đặt ra là cần có nguồn cung cấp hydro ổn định và tiện lợi ngay trên xe để động cơ hoạt động liên tục với hỗn hợp nhiên liệu nói trên.

### e) Dùng phụ gia nhiên liệu

Nhiên liệu của động cơ đốt trong không đơn thuần là sản phẩm của một quá trình chưng cất từ một công đoạn nào đó của dầu mỏ, nó là một sản phẩm hỗn

hợp được lựa chọn cẩn thận từ một số thành phần kết hợp với một số phụ gia nhằm đảm bảo cho điều kiện vận hành thực tế và lưu trữ bảo quản.

Hơn nữa, ngoài mục đích lưu trữ và bảo quản, việc sử dụng phụ gia nhiên liệu còn nhằm mục đích giảm thành phần khí độc hại một cách hiệu quả. Tuy nhiên, để đạt được mục đích này, vấn đề đặt ra là cần lựa chọn loại phụ gia nào cho phù hợp, hàm lượng pha trộn là bao nhiêu, vấn đề giá thành, công nghệ sản xuất cũng là một vấn đề cần xem xét.

Nguyên lý tác dụng chung của một số phụ gia nhiên liệu trong việc cải thiện đặc tính cháy của nhiên liệu và giảm thành phần độc hại của khí xả là tạo ra môi trường oxi trong quá trình cháy, làm cho nhiên liệu cháy nhanh hơn, tiếp tục cháy một phần sản phẩm CO, HC độc hại. Một số phụ gia còn hình thành môi trường hydro tạo ra phản ứng xúc tác quá trình cháy làm cho quá trình cháy hoàn thành một cách tốt nhất.

Với nguyên tắc tác dụng như trên, có thể thấy phương pháp dùng phụ gia nhiên liệu, đặc biệt là khi lựa chọn được loại phụ gia thích hợp là một phương pháp hiệu quả và khả thi nhất trong việc cải thiện quá trình cháy của nhiên liệu và giảm hơn nữa thành phần độc hại khí xả để đáp ứng các tiêu chuẩn khí xả ngày càng ngặt nghèo.

### ***1.3. Mục tiêu nghiên cứu của đề tài***

Trong tình hình thế giới đang ngày càng phát triển hàng hóa công nghiệp hàng năm ngày càng tăng, nguồn năng lượng tiêu thụ trên thế giới ngày càng lớn. Động cơ đốt trong là nguồn cung cấp năng lượng chủ yếu trên trái đất chính vì vậy mà lượng khí thải từ động cơ đốt trong hàng năm trên thế giới ngày càng tăng, gây ô nhiễm môi trường nặng nề, ảnh hưởng trực tiếp tới biến đổi khí hậu ngày càng phức tạp, ảnh hưởng tới sức khỏe con người, gây ra nạn tuyệt chủng động thực vật trên toàn thế giới.

Để giảm lượng độc hại phát ra từ khí thải động cơ đốt trong mà vẫn có thể duy trì được tốc độ phát triển của nền công nghiệp trên thế giới. Một số nước có nền công nghiệp phát triển hàng đầu trên thế giới, cũng là những nước có lượng khí thải phát sinh độc hại gây ô nhiễm nhiều nhất trên thế giới như: Mỹ, Nhật Bản và một số nước Châu Âu đã đi đầu trong việc nghiên cứu và đưa ra các biện pháp giảm thiểu lượng khí thải độc hại ra ngoài môi trường. Bên cạnh đó các nước này cũng đưa ra các tiêu chuẩn về nồng độ các chất độc hại trong khí thải động cơ và bắt buộc các hàng sản xuất trong nước cũng như nhập khẩu đều phải tuân thủ các tiêu chuẩn khí thải.

Việt Nam là một nước đang phát triển chúng ta cũng đi theo xu hướng chung của thế giới đó là: Phát triển bền vững tức là phát triển nhưng phải bảo vệ môi trường. Chính vì vậy nước ta đã đưa ra lộ trình áp dụng các tiêu chuẩn khí thải theo đó Việt Nam sẽ áp dụng tiêu chuẩn EURO 3 và EURO 4 vào năm 2017 cho tất cả các phương tiện vận tải.

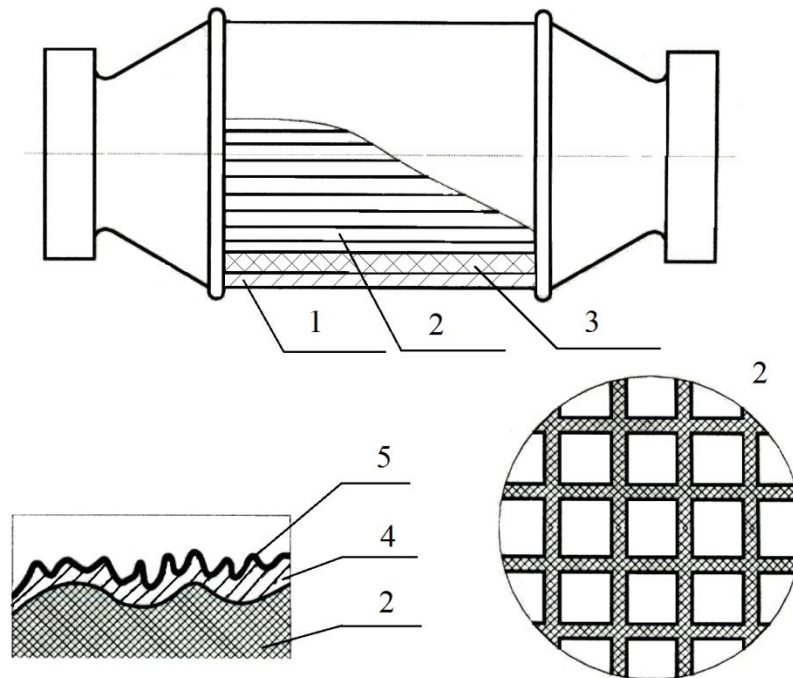
Từ các vấn đề nêu trên cho thấy cần thiết phải đẩy mạnh phát triển và ứng dụng các biện pháp hạn chế ô nhiễm từ khí thải từ các động cơ đốt trong trong đó chủ yếu là động cơ xăng và động cơ diesel. Để đáp ứng được những tiêu chuẩn khí thải nói trên nhiều giải pháp kỹ thuật đã được đưa ra. Một trong những biện pháp hiệu quả là sử dụng bộ xúc tác xử lý khí thải. Đây là biện pháp đã được nhiều nhà sản xuất và quốc gia trên thế giới áp dụng, đây là giải pháp cho thấy hiệu quả cao, có khả năng đáp ứng được những quy định ngày càng chặt chẽ về hạn chế ô nhiễm. Hiện nay có hai xu hướng nghiên cứu để đánh giá việc giảm thiểu các chất gây ô nhiễm qua bộ xúc tác đó là thực nghiệm và mô phỏng. Để đánh giá khả năng phát thải các chất gây ô nhiễm có trong khí xả động cơ có thể được tiến hành mô phỏng qua nhiều phần mềm mô phỏng như Analysis, Matlab, đặc biệt là các phần mềm AVL, FIRE, HYDSIM, EXCITE, GLIDE, TYCON, BRICKS của hãng AVL (cộng hòa Áo)...Việc tiến hành mô phỏng đánh giá khả năng giảm thiểu các chất khí gây ô nhiễm thông qua bộ xúc tác ba thành phần bằng các phần mềm thể hiện nhiều ưu điểm như giúp có cái nhìn trực quan sinh động hơn các phản ứng, các công thức khó có thể quan sát được trong thực tế, giúp cho người nghiên cứu có thể loại bỏ bớt những thí nghiệm không cần thiết, dễ dàng phân tích để có thể giảm bớt chi phí thực nghiệm. Bên cạnh đó, chúng ta cũng có thể tiến hành đánh giá khả năng làm giảm thiểu khí thải ô nhiễm qua bộ xúc tác ba thành phần bằng thực nghiệm. Ưu điểm của cách làm này là đánh giá được chính xác khả năng giảm thiểu khí thải ô nhiễm của bộ xúc tác ba thành phần nhưng nhược điểm của phương pháp này là tốn nhiều chi phí cho quá trình thực nghiệm.

## Chương II. NGUYÊN LÝ LÀM VIỆC VÀ CƠ SỞ LÝ THUYẾT MÔ PHỎNG BỘ XÚC TÁC BA THÀNH PHẦN

### 2.1. Nguyên lý làm việc của bộ xúc tác ba thành phần

#### 2.1.1. Cấu tạo bộ xúc tác ba thành phần

Bộ xử lý xúc tác ba thành phần (Three-Ways Catalytic Converter- TWC) – Đồng thời xử lý tới 90% CO, HC và NO<sub>x</sub> [3]



Hình 2.1. Cấu tạo của bộ xúc tác ba thành phần

1. vỏ; 2. lõi; 3. lớp đệm; 4. lớp vật liệu trung gian; 5. lớp xúc tác.

Bộ xúc tác 3 thành phần được bố trí nằm giữa đường ống thải động cơ và bộ giảm âm, nhưng gần đường ống thải hơn để tận dụng nhiệt lượng cho các phản ứng hóa học (nhiệt độ lưu trường 200 – 300°C), vật liệu chế tạo là thép không gỉ, hình trụ tròn hoặc ô van, ở hai đầu có lắp mặt bích để nối với các đường ống trung gian trong hệ thống thải. Cấu tạo bên trong bộ xúc tác bao gồm phần lõi và các lớp phủ chất xúc tác.

Bộ phận quan trọng nhất của bộ xúc tác 3 thành phần là phần lõi của nó. Hiện nay có ba dạng lõi khác nhau đó là lõi dạng viên gốm, lõi gốm nguyên khối và lõi bằng kim loại.

+ Lõi dạng viên gốm gồm các lớp viên gốm hình cầu. Vật liệu chế tạo được làm từ gốm chịu nhiệt độ cao (cordierite  $2\text{MgO} \cdot 2\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{SiO}_2$ ), có hệ số hấp thụ nhiệt thấp và nhiệt độ nóng chảy cao (khoảng 1.400°C). Các viên gốm có đường kính khoảng 2 – 3mm được phủ bề mặt ngoài bằng oxit nhôm, chúng có khả

năng chống mòn và ma sát tốt sau khi được nhiệt luyện ở nhiệt độ khoảng 1000°C và được gọi là lớp nền. Sau khi được phủ bề mặt ngoài, các vật liệu quý Platin (Pt), Paladi (Pd) và Rhodium (Rh) sẽ được thấm trực tiếp trên bề mặt của các viên gốm.

+ Dạng lõi gốm nguyên khối thường có cấu trúc tổ ong, gồm rất nhiều rãnh nhỏ li ti cỡ milimet được xếp song song với dòng chảy của khí thải. Lõi gốm cũng được làm từ vật liệu chịu nhiệt cordierite, các rãnh nhỏ song song có tiết diện ngang hình tam giác hoặc hình vuông. Các rãnh dẫn khí thải này được phủ một lớp oxit nhôm ( $Al_2O_3$ ) xốp, mỏng mô dày khoảng 0.02 mm. Sau đó lõi gốm được thấm các kim loại quý bạch kim – Pt (Platinum), Pd (palladium) và Rh (rhodium).



*Hình 2.2. Cấu trúc lõi dạng gốm nguyên khối*

+ Lõi kim loại gồm các lá thép phẳng và các lá thép dập lượn sóng có độ dày từ 0.04 – 0.05mm được xếp thành lớp. Sau đó, chúng được cuộn tròn thành hình dạng chữ S hoặc hình tròn. Phổ biến nhất là loại lõi kim loại chia thành 2 phần riêng biệt, giữa hai phần có một khoảng trống nhỏ.

+ Lõi thép được phủ bằng  $Al_2O_3$  có độ xốp cao và sau đó được thấm kim loại quý Pt, Pd và Rh. So với hai loại lõi trên thì loại lõi kim loại có nhiều ưu điểm vượt trội hơn như diện tích tiết diện sử dụng có ích của các rãnh dẫn khí

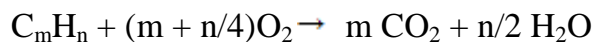
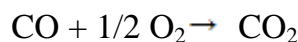


thải lớn hơn khoảng 10 ÷ 15%, độ bền cao hơn, trở lực (mức độ cản trở chuyển động của dòng khí) đối với khí thải thấp. Nhưng công nghệ chế tạo lõi kim loại phức tạp hơn, khối lượng lớn hơn và giá thành đắt hơn 15%.

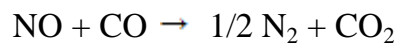
### 2.1.2 Nguyên lý làm việc của bộ xúc tác

Bộ xúc tác ba thành phần có tác dụng tăng cường các quá trình oxy hóa và khử các thành phần độc hại trong khí thải động cơ, các phản ứng chính bao gồm những phản ứng sau:

Quá trình oxy hóa gồm có:



Còn quá trình khử NO được thực hiện nhờ phản ứng với CO:



Bộ xử lý xúc tác đã được sử dụng trong hệ thống thải của động cơ trong hơn ba thập kỷ qua, chúng làm giảm đáng kể hàm lượng độc hại trong khí xả động cơ. Các bộ xử lý xúc tác ba tác dụng được sử dụng trên các phương tiện giao thông ngày nay có khả năng giảm tới 90% lượng khí thải độc hại phát ra từ động cơ khi nó được sấy nóng hoàn toàn đạt nhiệt độ >350°C. Các chất xúc tác Platinum (Pt), Rhodium (Rh) là những vật liệu xúc tác có hoạt tính cao cùng với Ceria (CeO<sub>2</sub>) có khả năng chứa oxy nên bộ xúc tác có thể oxy hóa liên tục đối với CO, HC ngay cả khi khí xả có hàm lượng lớn CO, HC và thiếu không khí. Sự chuyển đổi của CO, HC đòi hỏi một môi trường oxy hóa, trong khí đó sự chuyển đổi NO<sub>x</sub> đòi hỏi môi trường khử. Do vậy bộ xử lý xúc tác ba thành phần hoạt động có hiệu quả khi thành phần hỗn hợp gần điều kiện lý tưởng  $\lambda = 1$  để có cả môi trường oxy hóa và môi trường khử. Với hỗn hợp giàu nhiên liệu thì sự oxy hóa CO, HC giảm, trong khi với hỗn hợp nghèo sự khử NO<sub>x</sub> giảm.

Do đòi hỏi ngặt nghèo và chính xác về hệ số dư lượng không khí  $\lambda$  để bộ xử lý xúc tác làm việc có hiệu quả cho nên bộ xử lý này thường được trang bị trên động cơ có hệ thống điều khiển điện tử (ECU). Bộ xử lý này làm giảm đáng kể lượng khí xả độc hại. Tuy nhiên, vấn đề tồn tại của bộ xử lý xúc tác là nó làm việc không hiệu quả ở nhiệt độ thấp hơn 200 ÷ 300°C, do vậy trong giai đoạn khởi động và chạy ấm máy các khí xả độc hại thoát ra khỏi động cơ thải trực tiếp ra ngoài gây ô nhiễm môi trường.

### 2.2. Cơ sở lý thuyết mô phỏng bộ xúc tác ba thành phần

Trong bộ xúc tác ba thành phần các phản ứng hóa học và quá trình truyền nhiệt diễn ra rất phức tạp. Phần dưới đây sẽ trình bày rõ hơn về đặc điểm truyền

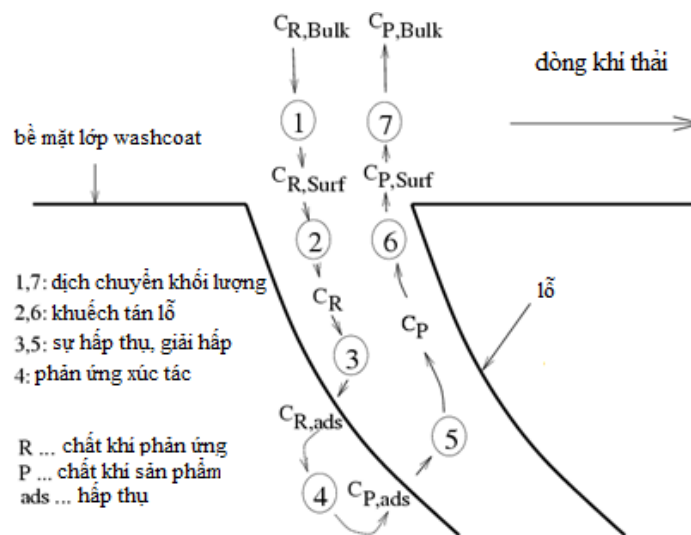
nhệt cũng như các phản ứng hóa học và tốc độ phản ứng diễn ra trong bộ xúc tác ba thành phần.

### 2.2.1. Cơ chế của các phản ứng xúc tác dị thể

Trong phần này sẽ trình bày về cơ chế của những phản ứng trong bộ xúc tác ba thành phần. Các phản ứng hóa học xúc tác là các phản ứng dị thể bởi chất xúc tác và chất phản ứng là hai pha khác nhau. Mô hình bộ xúc tác đòi hỏi xem xét cả tính chất vật lý và tính động học của các phản ứng.

Thông thường có một lớp ranh giới giữa dòng khí thải và bề mặt chất rắn. Trong lớp ranh giới này có những biến đổi về tốc độ, nồng độ và nhiệt độ. Việc dịch chuyển với số lượng lớn các chất khí trong pha khí có thể ảnh hưởng đến tốc độ của các phản ứng xúc tác.

Hầu hết các bộ xúc tác đều có dạng lỗ xốp. Các phản ứng hóa học xảy ra bên trong các lỗ dạng tổ ong của bộ xúc tác.



Hình 2.3. Các bước của phản ứng xúc tác

Hình 2.3 cho thấy các bước diễn ra trong các phản ứng xúc tác dị thể. Các bước diễn ra trong các phản ứng xúc tác bao gồm 5 giai đoạn:

- Sự di chuyển của các chất khí từ pha khí với số lượng lớn trên bề mặt.
- Sự khuếch tán các chất khí vào các lỗ của bộ xúc tác. Khi lớp washcoat được phủ lên trên bề mặt trong các lỗ, các chất khí được khuếch tán vào nó
- Sự hấp thụ của các chất khí lên trên bề mặt lớp washcoat.
- Các phản ứng xúc tác diễn ra trên bề mặt

- Sự khuếch tán các sản phẩm vào môi trường

### 2.2.2. Tỷ số lamda

Mô hình xem xét công thức tính tỷ số lamda được sử dụng [5]

Tỷ số A/F được tính bằng công thức:

$$\lambda = \frac{y_{O_{2,air}}}{4+x} \cdot \frac{4Y+x(2-2y_{H_2}-2y_{CO}-8y_{C_3H_8}+2y_{O_2}+y_{NO})}{y_{H_2}+y_{CO}+10y_{C_3H_8}-2y_{O_2}-y_{NO}+y_{O_{2,air}}Y}$$

Với  $Y = (2 - y_{H_2} - y_{CO} + 2y_{C_3H_8})$

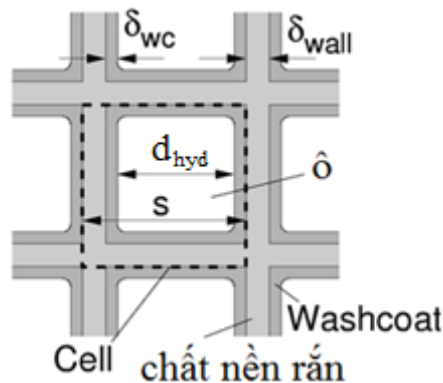
Trong đó:

$y_{O_{2,air}}$  là phần trăm thể tích của oxy trong không khí với giá trị  $y_{O_{2,air}} = 20.37\%$

$y_{H_2}$ ,  $y_{CO}$ ,  $y_{C_3H_8}$ ,  $y_{O_2}$ ,  $y_{NO}$  lần lượt là phần trăm thể tích của các chất khí  $H_2$ ,  $CO$ ,  $C_3H_8$ ,  $O_2$ ,  $NO$  ở đầu vào bộ xúc tác ba thành phần

### 2.2.3. Đặc điểm của lỗ rỗng trong khối xúc tác có cấu trúc dạng tổ ong

Bộ xúc tác chứa nhiều rãnh nhỏ song song có tiết diện hình vuông với cấu trúc giống như tổ ong. Khí thải chảy qua các rãnh này và có phản ứng xúc tác. Các phản ứng xúc tác diễn ra trên các lớp washcoat của khối monolith. Washcoat là một lớp vật liệu nền được phủ lên bề mặt các rãnh của khối monolith được thể hiện như hình 18

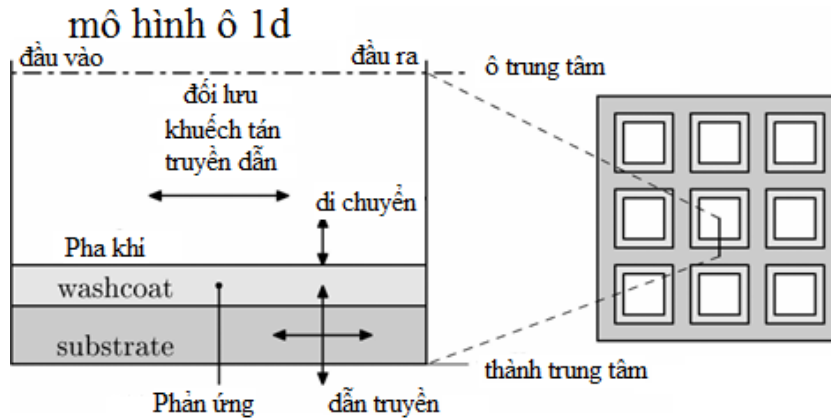


Hình 2.4: Cấu trúc hình vuông của khối monolith dạng tổ ong

### 2.3. Phương trình cân bằng

Ảnh hưởng về nhiệt đến bộ xúc tác theo hướng xuyên tâm là nhỏ so với hướng trục. Trạng thái vật lý trong các lỗ rỗng của bộ xúc tác được miêu tả trong hình. Các tác động đang xảy ra là sự đối lưu, khuếch tán và truyền nhiệt trong các

pha khí. Khối lượng và năng lượng của các chất khí được truyền qua các lớp biên, khuếch tán và chuyển đổi ở lớp washcoat.



Hình 2.5. Một ô đơn trong bộ xúc tác chuyển đổi dạng tổ ong

Sự khác biệt của phương trình bảo toàn momen và năng lượng trong một lỗ của bộ xúc tác được thể hiện trong phần sau

Các phương trình trong pha khí

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} = \frac{\partial \rho_g \cdot v_g}{\partial z}$$

Trong đó:

- $\rho_g$  là khối lượng riêng của pha khí,
- $t$  là thời gian,
- $v_g$  là vận tốc của dòng khí,
- $z$  là các không gian theo hướng trục trong bộ xúc tác

Phương trình bảo toàn momen được cho bởi phương trình Darcy

$$\frac{\partial P_g}{\partial z} = -A_D \cdot v_g$$

Trong đó:

- $z$  là các không gian theo hướng trục trong bộ xúc tác
- $P_g$  là áp suất của pha khí
- $v_g$  là vận tốc của pha khí
- $A_D$  là hằng số Darcy được tính bằng công thức:

$$A_D = \varphi \cdot \frac{v_g}{2} \cdot \frac{\rho_g}{d_{hyd}} \cdot \zeta = \varphi \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{\dot{m}}{A_{cross} d_{hyd}} \cdot \zeta$$

Trong đó:

- $d_{hyd}$  là bề rộng ô
- $\zeta$  là hệ số ma sát.
- $\dot{m}$  là lưu lượng
- $\varphi$  là hệ số ma sát Fanning
- $v_g$  là vận tốc của pha khí
- $\rho_g$  là khối lượng riêng của pha khí
- $A_{cross}$  là diện tích mặt cắt ngang của khối xúc tác

### 2.3.1. Truyền nhiệt và định luật Fourier

Định luật Fourier phát biểu rằng mật độ dòng nhiệt chảy qua một vật liệu trong một đơn vị thời gian tỷ lệ thuận với trái dấu của gradient nhiệt độ theo chiều dòng nhiệt và với diện tích vuông góc với dòng nhiệt

$$\dot{q} = \lambda_g \cdot \nabla T$$

Trong đó:

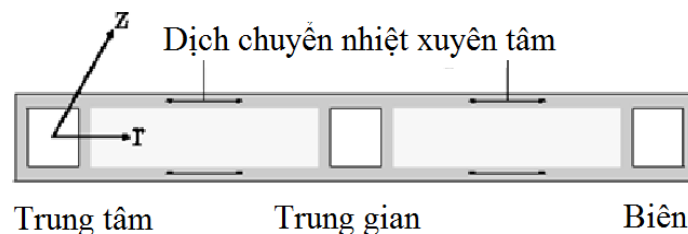
$\dot{q}$  là thông lượng nhiệt

$\lambda_g$  là độ dẫn nhiệt

$\nabla T$  là gradient nhiệt độ

### 2.3.2. Nhiệt động lực học trong các lỗ của khối xúc tác

Nhiệt động lực học trong mỗi lỗ của khối xúc tác được đại diện bởi phương trình bảo toàn khối lượng, động lượng và năng lượng. Sự phân bố nhiệt độ ( $T_s$ ) theo hướng xuyên tâm của bộ chuyển đổi xúc tác được giả định là phụ thuộc vào các dòng nhiệt qua vị trí như trong hình



Hình 2.6. Dịch chuyển nhiệt xuyên tâm trong bộ chuyển đổi xúc tác

Việc so sánh tính dẫn nhiệt trong khối xúc tác  $\lambda_s$  và trong pha khí  $\lambda_g$  tương ứng cho thấy rằng việc dịch chuyển nhiệt theo hướng xuyên tâm qua pha khí và khối xúc tác là không đáng kể. Các phản ứng truyền nhiệt theo hướng xuyên tâm của khối xúc tác được đưa ra bởi công thức

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{d}{dr} \left( r \cdot \lambda_s \cdot \frac{dT_s}{dr} \right) + \dot{r} = 0$$

$$\frac{dT_s}{dr} = 0 \Big|_{r=0} \quad T_s = T_{ambient} \Big|_{r=R}$$

Trong đó:

$T_s$  là nhiệt độ của khối xúc tác được xác định bởi

$$T_s(r) = a_0 + a_1 \cdot r + a_2 r^2 + \dots = \sum_{m=0}^M a_m \cdot r^m$$

Sự phân bố xuyên tâm của nhiệt độ khối xúc tác  $T_s(r)$  được xác định bởi một hàm đa thức M tương ứng với số lượng lỗ của mô hình khối xúc tác.

Các hệ số đa thức được xác định bằng việc giải phương trình trên với nhiệt độ được xác định tại mỗi lỗ của khối xúc tác. Khi biên dạng nhiệt độ xuyên tâm được xác định, các dòng nhiệt tại các vị trí tùy ý có thể được tính bằng cách áp dụng sự chênh lệch nhiệt độ trong không gian này. Lưu lượng vào ra mỗi lỗ theo hướng xuyên tâm hoàn tất việc cân bằng năng lượng giữa hai lỗ. Điều này có thể đưa vào để tính toán các đặc điểm chuyển đổi trong không gian thông qua việc phân bố của nhiệt độ trong không gian. Bằng cách sử dụng các hàm phân tích lấy từ các giải pháp số học, các giải pháp của biên dạng nhiệt độ xuyên tâm có thể thu được kết quả hội tụ.

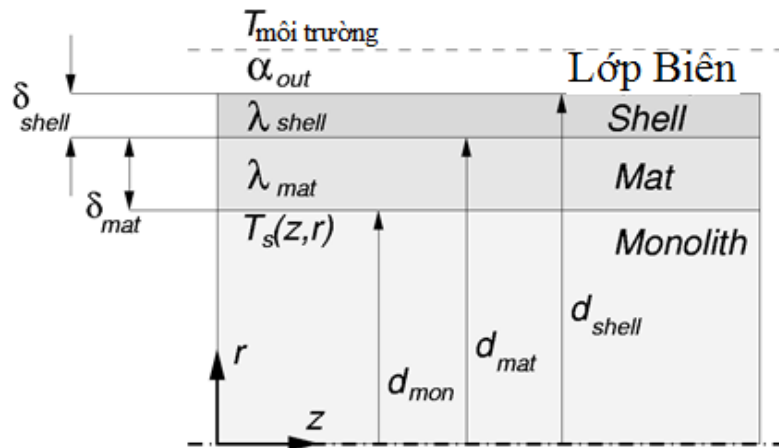
### 2.3.3. Nhiệt động lực học và đặc điểm truyền nhiệt

Đặc tính nhiệt động lực học và truyền nhiệt cần thiết cho việc mô phỏng trong bộ xúc tác và là giải pháp cho tất cả các phương trình cân bằng trong bộ xúc tác

#### 2.3.3.1. Điều kiện biên

Ở điều kiện biên, nhiệt của thành được lấy ra từ các enthalpy của các phản ứng trong pha khí và nhiệt của các phản ứng trong pha rắn. Hệ số truyền nhiệt của thành tỷ lệ thuận với độ dẫn nhiệt của khối xúc tác và tỉ lệ nghịch với bề rộng của thành. Hệ số truyền nhiệt của khối xúc tác có thể rất cao do sự phụ thuộc vào bề rộng của thành. Khi giảm bề rộng thành, hệ số truyền nhiệt tăng nhưng nhiệt độ của các bề mặt trong các rãnh của bộ xúc tác giảm tạo ra một dòng nhiệt ở thành.

Theo hướng xuyên tâm của bộ xúc tác, điều kiện đoạn nhiệt hoặc tổn thất nhiệt được xác định



Hình 2.7. Tổn thất nhiệt theo hướng xuyên tâm ra môi trường xung quanh

Trao đổi nhiệt theo hướng xuyên tâm, như được phác họa trong hình trên được đánh giá xem xét truyền qua vật liệu cách nhiệt, lớp vỏ và lớp biên vì vậy công thức sau được áp dụng cho dòng nhiệt

$$\frac{\dot{Q}_{loss}}{\Delta Z} = k_{out} \cdot d_{mon} \cdot \pi \cdot (T_s(z, r = R) - T_{env})$$

Trong đó:

- $\dot{Q}_{loss}$  là tổn thất nhiệt theo hướng xuyên tâm
- $\Delta Z$  là chiều dài của một ô được tính toán
- $d_{mon}$  là đường kính của khối monolith,
- $z$  là độ rộng của ô vuông tính toán,
- $T_s(z, r=R)$  là nhiệt độ chất rắn tại lớp biên,
- $T_{env}$  là nhiệt độ môi trường,
- $k_{out}$  là hệ số truyền nhiệt ra ngoài môi trường được xác định bằng công thức:

$$k_{out} = 1 / (d_{mon} / 2 \cdot [1 / \lambda_{mat} \cdot \ln(d_{mat} / d_{mon}) + 1 / \lambda_{shell} \cdot \ln(d_{shell} / d_{mat}) + 1 / \alpha_{out}])$$

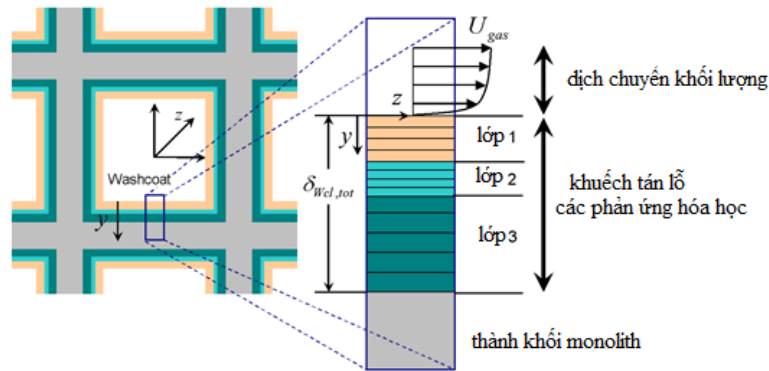
Trong đó:

- $\lambda_{mat}$ ,  $\lambda_{shell}$  và  $d_{mat}$ ,  $d_{shell}$  lần lượt mô tả độ dẫn nhiệt, vị trí không gian của các vật liệu cách nhiệt và vỏ.
- $d_{mon}$  là đường kính khối monolith
- $\alpha_{out}$  là hệ số truyền nhiệt giữa bề mặt khối chất rắn và vỏ

## 2.4. Sự khuếch tán trong lớp washcoat

### 2.4.1. Mô hình khuếch tán

Hình 24 thể hiện nguyên lý hoạt động của bộ xúc tác dạng tổ ong với các phản ứng đồng thể. Các phản ứng trong bộ xúc tác có cấu trúc dạng tổ ong đều xảy ra trên lớp washcoat. Bộ xúc tác được tạo thành do gốm ép thành vật liệu có dạng lỗ. Các kim loại quý được phân bố trên bề mặt lớp washcoat trong các lỗ và những chất phản ứng trong pha khí được khuếch tán vào nó và xảy ra phản ứng. Theo Hayes hàm lượng các chất phản ứng trong pha khí sẽ được chuyển hóa ở trên bề mặt chất xúc tác. Các chất phản ứng được khuếch tán vào lớp washcoat và diễn ra sự hấp thụ của chất phản ứng lên bề mặt của chất xúc tác và các phản ứng hóa học diễn ra, sau đó sản phẩm sẽ được giải hấp và khuếch tán vào môi trường.



Hình 2.8. Bộ xúc tác với các lỗ ô vuông được phủ lớp washcoat

### 2.5.1. Hệ số bám

Với một số phản ứng trên bề mặt vật liệu xúc tác, tốc độ của phản ứng có thể được tính qua hệ số bám. Các hệ số bám thể hiện khả năng hấp thụ của các phân tử trên bề mặt vật liệu xúc tác khi xảy ra va chạm

Các hệ số bám được tính qua công thức

$$\gamma_i = \min \left[ 1, A_i \cdot T^{b_i} \cdot \exp \left( \frac{-E_i}{R \cdot T} \right) \right]$$

Trong đó:

- $E_i$  là năng lượng hoạt hóa của phản ứng  $i$
- $T$  là nhiệt độ phản ứng
- $A_i$  là hệ số trước hàm số mũ của phản ứng  $i$

Việc xây dựng công thức liên hệ giữa hệ số bám với các hằng số tốc độ động học được thể hiện trong biểu thức dưới đây:



$$k_{f_i} = \frac{\gamma_i}{(\Gamma_{\text{tot}})^m} \cdot \sqrt{\frac{R \cdot T}{2 \cdot \pi \cdot M_{k,g}}}$$

Trong đó:

- $M_{k,g}$  là khối lượng phân tử của chất khí phản ứng trong pha khí,
- $\Gamma_{\text{tot}}$  là tổng nồng độ của chất khí trên bề mặt,
- $m$  là tổng tất cả các hệ số cân bằng hóa học của chất phản ứng trên
- $R$  là hằng số khí lý tưởng
- $T$  là nhiệt độ phản ứng

## Chương III. MÔ PHỎNG BỘ XÚC TÁC BA THÀNH PHẦN LẮP TRÊN XE MÁY

### 3.1. Giới thiệu phần mềm

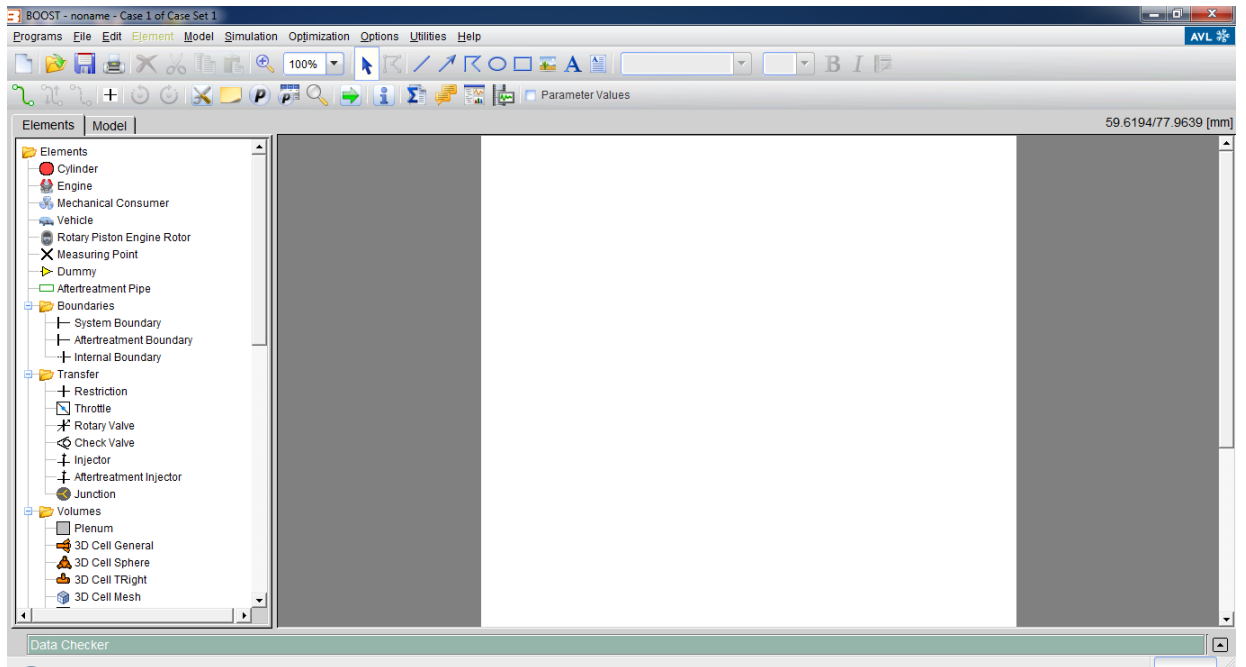
Phần mềm BOOST là một phần mềm nằm trong bộ phần mềm của hãng AVL, cửa sổ khởi động phần mềm BOOST được thể hiện trên hình 1



Hình 3.1: Cửa sổ khởi động của phần mềm Boost

Cửa sổ giao diện của phần mềm BOOST khi khởi động xong để chuẩn bị bước vào quá trình xây dựng mô hình để mô phỏng được thể hiện ở hình 2.











Thanh công cụ Programs, File, Edit, Element, Model, Simulation, Options, Utilities và Help. Chức năng của các thanh công cụ thể hiện rõ ở phần Help. Các phần tử có sẵn của chương trình được đặt phía bên trái màn hình. Việc xây dựng mô hình được thực hiện bên phải màn hình. Các phần tử được copy từ bên trái màn hình (danh mục các phần tử) và được đưa sang bên phải màn hình (trong vùng vẽ). Việc sắp xếp, thay đổi kích thước và hướng của các phần tử được thực hiện bằng các phím chức năng khác nhau.







Hình 3.2: Cửa sổ giao diện chính của phần mềm boost

Để có được mô hình tính, trước tiên cần phải triển khai việc xây dựng mô hình trên vùng vẽ. Các biểu tượng sử dụng theo các chức năng riêng biệt khác nhau. Các lệnh cơ bản của chương trình thể hiện ở bảng 2.1:



Bảng 3.1: Các lệnh cơ bản trong phần mềm AVL BOOST

 Connection	Chức năng kết nối dùng để nối các phần tử trong mô hình với nhau.
 Direction	Chức năng điều chỉnh lại hướng dòng chảy trong đường ống.
 Change	Chức năng thay đổi thứ tự kết nối giữa các phần tử đã chọn
	Chức năng quay phần tử ngược chiều kim đồng hồ 90°
	Chức năng quay phần tử theo chiều kim đồng hồ 90°
	Chức năng mở cửa sổ điều khiển chung
	Thiết lập mô hình
	Chức năng nhập thông số cho mô hình trên.
	Chức năng thiết lập thông số chuỗi mô hình
	Chức năng chạy mô hình.

	Chức năng hiện trạng thái tức thời của mô hình chạy
	Chức năng xem tổng kết của mô hình chạy.
	Chức năng xem lời nhắn từ mô hình chạy
	Chức năng xem kết quả mô hình chạy

Các phần tử mô phỏng được thể hiện trong bảng 3.2

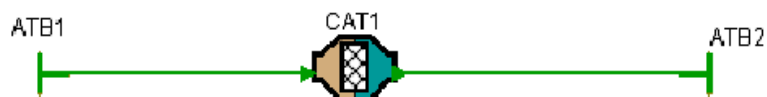
*Bảng 3.2: Các phần tử mô phỏng*

Điều kiện biên		Cho thấy môi trường quan của mô hình phân tích khí thải với các biến do người sử dụng định nghĩa.
Bộ xúc tác		Phần tử này có nhiệm vụ thay thế cho bộ xúc tác khí xả trên mô hình thực.

Sau khi thực hiện xong công việc lựa chọn và định vị các phần tử trên vùng vẽ, tiếp tục thực hiện việc nối các phần tử với nhau thông qua dây nối.

### 3.2. Xây dựng mô hình

Căn cứ vào thông số kỹ thuật của bộ xúc tác ba thành phần được lấy từ thông số thực của bộ xúc tác gắn trên xe máy (bảng 3.3), ta tiến hành xây dựng mô hình bộ xúc tác ba thành phần bằng phần mềm AVL boost từ các phần tử trong phần mềm. Hình 3.3 thể hiện mô hình bộ xúc tác ba thành phần được xây dựng bằng phần mềm AVL boost



*Hình 3.3. Mô hình bộ xúc tác ba thành phần*

Sau khi chọn xong các mô hình phần tử, ta tiến hành kết nối các phần tử đó lại với nhau bằng dây dẫn. Kết thúc quá trình bằng cách ấn chuột phải hoặc ấn esc

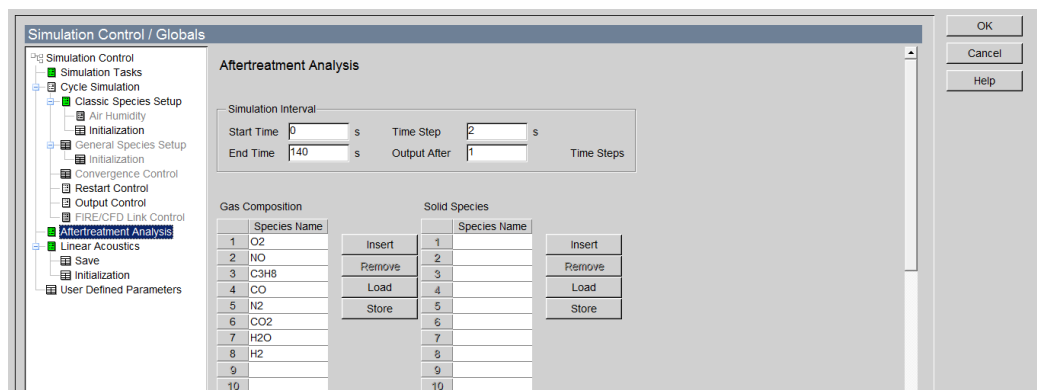
### 3.2.1. Nhập dữ liệu cho mô hình

#### 3.2.1.1. Nhập các thông số điều khiển chung

Nhập dữ liệu cho mô hình là vấn đề quyết định thành bại của mô hình đó. Một mô hình muốn có được kết quả theo đúng mong muốn thì dữ liệu nhập vào phải chính xác. Trong phần mềm BOOST việc nhập dữ liệu là vấn đề hết sức quan trọng. BOOST chia ra việc nhập dữ liệu cho các phần tử khác nhau là khác nhau để tăng tính chính xác cho mô hình. Có thể chia ra việc nhập dữ liệu trong BOOST thành hai phần: nhập dữ liệu chung và nhập dữ liệu cho các phần tử.

Dữ liệu điều khiển chung mô hình (Simulation Control)

Dữ liệu chung là dữ liệu chi phối toàn bộ quá trình mô phỏng của mô hình. Dữ liệu chung cần phải nhập đầu tiên trước khi nhập dữ liệu cho các phần tử cụ thể của BOOST. Màn hình nhập dữ liệu chung được thể hiện ở hình 3.4



Hình 3.4. Cửa sổ nhập dữ liệu chung cho mô hình

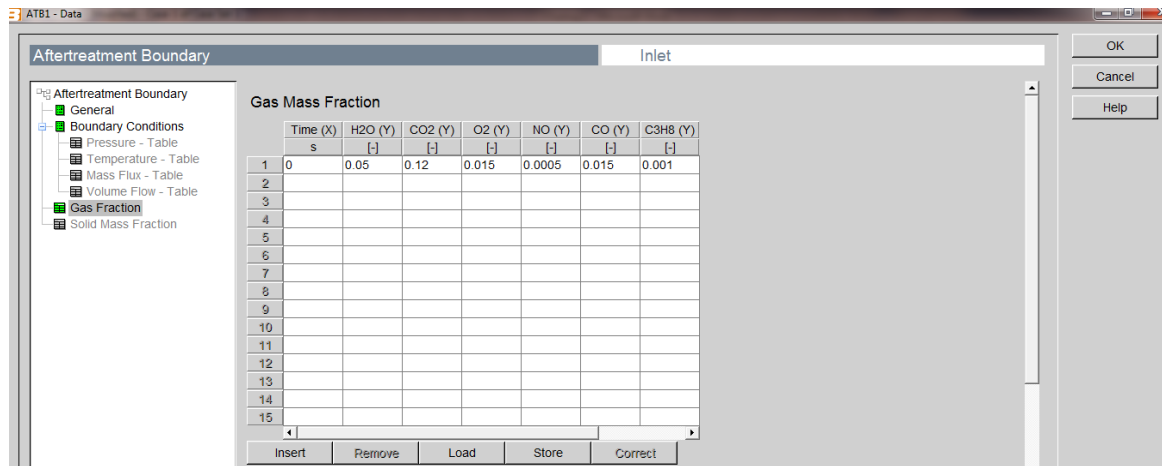
Các dữ liệu này được nhập thông qua các cửa sổ giao diện. Trong suốt quá trình tính các dữ liệu chung này sẽ là thông số điều khiển bên ngoài, điều khiển các quá trình chạy, truy xuất dữ liệu, cách tính cơ bản ...

Căn cứ vào nội dung bài toán mô phỏng và thông số kỹ thuật của bộ xúc tác ba thành phần ta nhập thông số chung của mô hình như trong bảng 3.4

Bảng 3.3. Thông số chung của mô hình

TT	Thông số	Giá trị	Đơn vị
1	Thời gian bắt đầu mô phỏng	0	giây
2	Thời gian kết thúc mô phỏng	140	giây
3	Thành phần khí thải đầu vào bộ xúc tác	CO, C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> , H <sub>2</sub> O, NO, N <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , CO <sub>2</sub>	-

Việc khai báo hàm lượng khí thải khi đi vào bộ xúc tác ba thành phần được thể hiện trong hình 3.6



Hình 3.5: Khai báo thông số điều kiện biên

Các thông số của hàm lượng khí thải đầu vào bộ xúc tác được lấy từ các thông số thực tế từ các kết quả đo ở phòng thí nghiệm được thể hiện trong bảng 3.6

Bảng 3.4. Thành phần khí thải đi vào bộ xúc tác ba thành phần

Thành phần khí thải	Gía trị	Đơn vị
CO	1.1566	%
CO <sub>2</sub>	8.978	%
H <sub>2</sub> O	12	%
NO	0.1461	%
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0.1257	%
N <sub>2</sub>	77.4968	%
O <sub>2</sub>	0.0968	%

Các thông số nhập vào bộ xúc tác ba thành phần được lấy từ thông số của bộ xúc tác thật trên xe máy và trong các tài liệu tham khảo của phần mềm. Phân tử bộ xúc tác ba thành phần được mô phỏng bao gồm 2 phần là thông số kết cấu của bộ xúc tác và các phản ứng diễn ra trong bộ xúc tác

Các thông số cần nhập cho phân tử bộ xúc tác ba thành phần được thể hiện trong bảng 3.7

Bảng 3.5. Thông số kết cấu bộ xúc tác ba thành phần

TT	Thông số	Giá trị	Đơn vị
1	Thể tích khối xúc tác	0.2	l
2	Chiều dài khối xúc tác	100	mm
3	Mật độ lỗ	200	cpsi
4	Bề dày thành khối xúc tác	0.007	in
5	Bề dày lớp washcoat	0.0005	in
6	Khối lượng riêng bộ xúc tác	671.5	Kg/m <sup>3</sup>
7	hệ số truyền nhiệt bên ngoài	30	W/m <sup>2</sup> .K
8	Chiều dày lớp vỏ	1	mm
9	chiều dày lớp cách nhiệt	10	mm
10	độ dẫn nhiệt của lớp vỏ	40	W/(m.K)
11	độ dẫn nhiệt của lớp cách nhiệt	0.3	W/(m.K)
12	hiệu độ môi trường	25	°C

Các phản ứng xảy ra trong bộ xúc tác ba thành phần gồm phản ứng khí với khí và phản ứng khí với rắn (vật liệu xúc tác) được thể hiện trong bảng 3.8

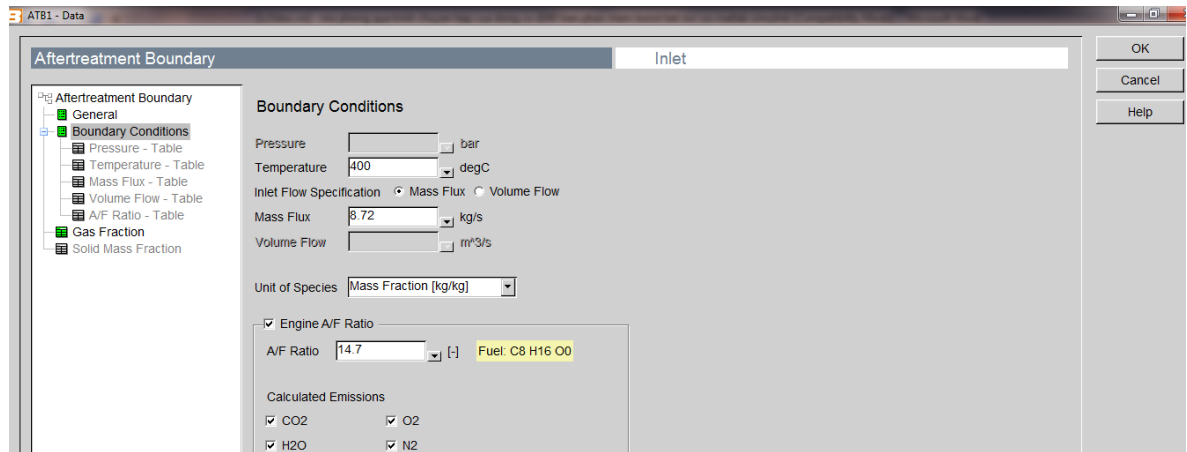
Bảng 3.6. Các phản ứng xảy ra trong bộ xúc tác ba thành phần

Phản ứng chất khí với chất khí	$\text{CO} + 1/2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ $\text{CO} + \text{NO} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{N}_2$ $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$ $\text{C}_3\text{H}_8 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$
Phản ứng chất khí với vật liệu xúc tác	$\text{Ce}_2\text{O}_3 + 1/2 \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CeO}_2$ $\text{CeO}_2 + \text{CO} \rightarrow \text{Ce}_2\text{O}_3 + \text{CO}_2$ $\text{CeO}_2 + \text{C}_3\text{H}_8 \rightarrow 7 \text{Ce}_2\text{O}_3 + 3\text{CO} + 4\text{H}_2\text{O}$ $\text{Rh} + \text{NO} \rightarrow \text{RhO} + \text{N}_2$ $\text{RhO} + \text{CO} \rightarrow \text{Rh} + \text{CO}_2$ $\text{Pt} + \text{O}_2 \rightarrow \text{PtO}$ $\text{PtO} + \text{CO} \rightarrow \text{Pt} + \text{CO}_2$ $\text{PtO} + \text{C}_3\text{H}_8 \rightarrow \text{Pt} + \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$

### 3.2.1.2. Nhập thông số cho điều kiện biên

Căn cứ vào các kết quả đo nhiệt độ, lưu lượng và thành phần khí thải thực tế tại phòng thí nghiệm, ta xác định các thông số của điều kiện biên ATB 1. Điều kiện biên ATB 1 thể hiện trạng thái nhiệt độ, lưu lượng và thành phần của khí thải khi đi vào bộ xúc tác ba thành phần

Việc khai báo các thông số đầu vào như nhiệt độ, lưu lượng dòng khí thải khi đi vào bộ xúc tác ba thành phần được thể hiện cụ thể trên hình 3.5



Hình 3.6: Khai báo thông số điều kiện biên

Các thông số của điều kiện biên ATB1, ATB2 được thể hiện trong bảng 3.4

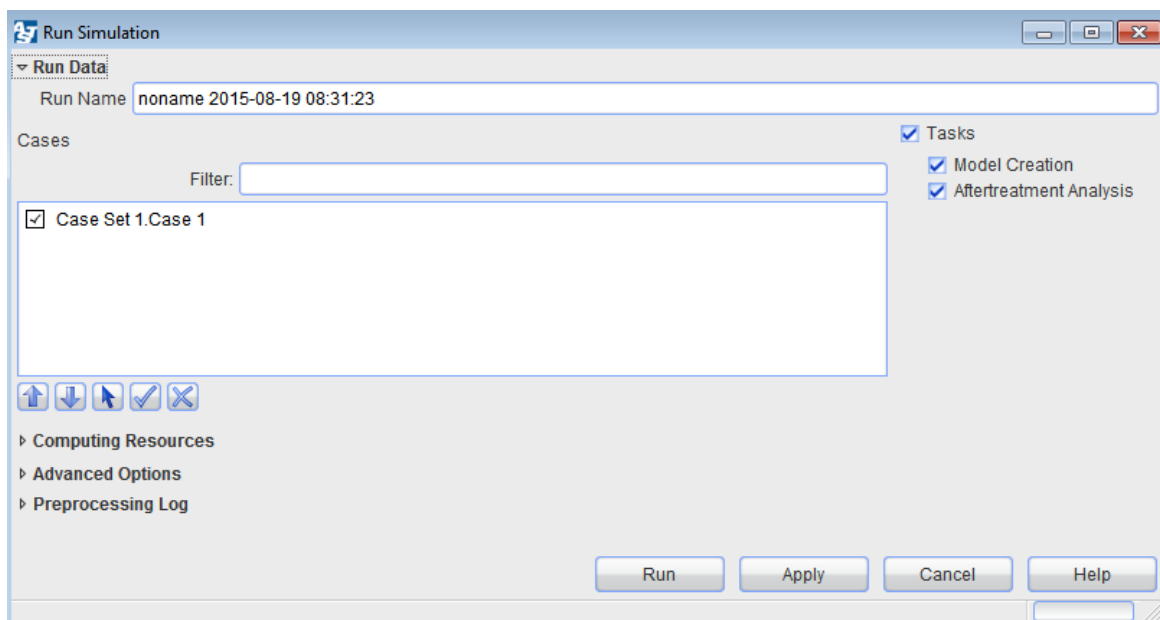
Bảng 3.7. Thông số của điều kiện biên

Điều kiện biên	Thông số	Giá trị	Đơn vị
Aftertreatment Boundary ATB 1	Lưu lượng	8.975	g/s
	Nhiệt độ	350	°C
Aftertreatment Boundary ATB 2	Áp suất	1	Bar

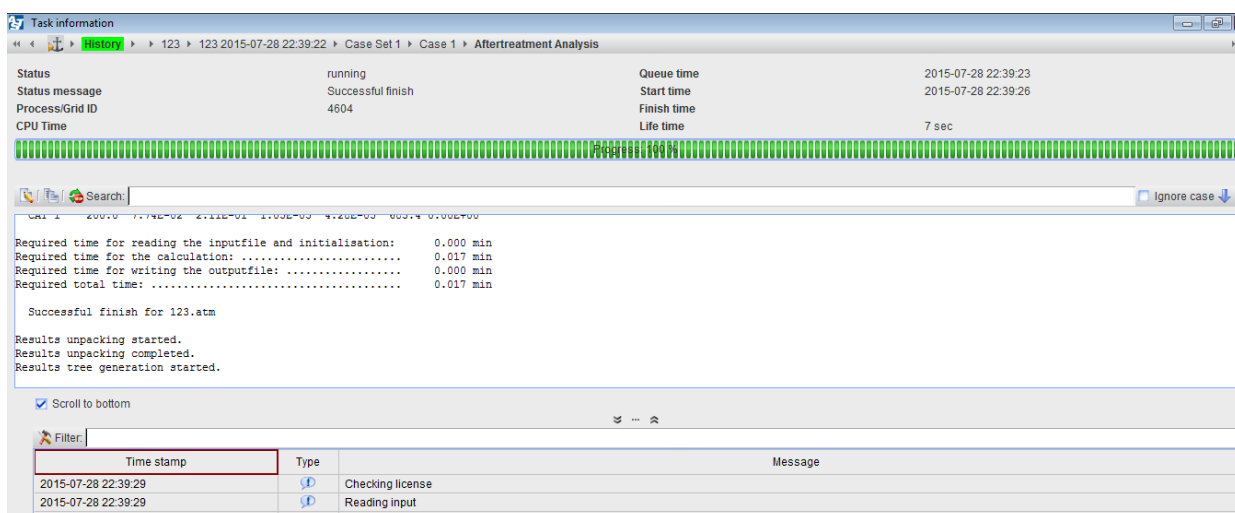
### 3.3. Chạy mô hình

Sau khi khai báo xong các thông số cần thiết cho mô hình, kiểm tra các lỗi của mô hình thông qua dòng lệnh phía dưới màn hình chúng ta bắt đầu cho chạy mô hình bằng việc nhấn vào dòng lệnh Simulation trên thanh công cụ của màn hình BOOST chọn run sau đó chọn tên chương trình chạy để BOOST lưu kết quả theo tên mà chúng ta đã đặt trước (trong hộp thoại Mode, chúng ta xây dựng nên các case sau đó khi chạy chúng ta cho lưu vào case). Trên hình 3.7, 3.8 thể hiện quá trình bắt đầu khởi động, và theo dõi quá trình mô phỏng.





Hình 3.7: Màn hình khởi động quá trình chạy mô phỏng



Hình 3.8: Màn hình theo dõi quá trình chạy mô phỏng

Kết quả mô phỏng được thể hiện dưới dạng bảng trong hình 3.9

CUMULATIVE SPECIES FLUXES

NUMBER OF CATALYST : 1

Start time (s) : 0.00000  
End time (s) : 140.00000

Nr	Species-Name	Inlet Mass (g)	Outlet Mass (g)	Conversion (%)
1	O2	7.26416	0.15641	97.84677
2	NO	1.83685	0.88341	51.90639
3	C3H8	1.58256	1.08214	31.62068
4	CO	14.60539	4.01882	72.48400
5	N2	925.25595	925.71178	-0.04927
6	CO2	152.91834	170.92149	-11.77305
7	H2O	153.03676	153.76457	-0.47558
8	H2	0.00000	0.00085	-855634.54558

CUMULATIVE SPECIES FLUXES

Hình 3.9. Kết quả mô phỏng dưới dạng bảng

### 3.4. Kết quả mô phỏng

Bài toán mô phỏng được thực hiện theo 2 bước:

Bước 1:

Căn cứ vào các thông số thực tế như thông số kết cấu của bộ xúc tác ba thành phần, lưu lượng nhiên liệu, nhiệt độ, lamda được đo tại phòng thí nghiệm sẽ là cơ sở để nhập dữ liệu vào mô hình

Bước 2:

Tiến hành thay đổi nhiệt độ, lưu lượng, thể tích bộ xúc tác để đánh giá hàm lượng phát thải của các chất khí gây ô nhiễm CO, HC, NO<sub>x</sub> thông qua bộ xúc tác ba thành phần được lắp trên xe máy.

### **3.4.1. Đánh giá hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khi thay đổi lưu lượng khí thải**

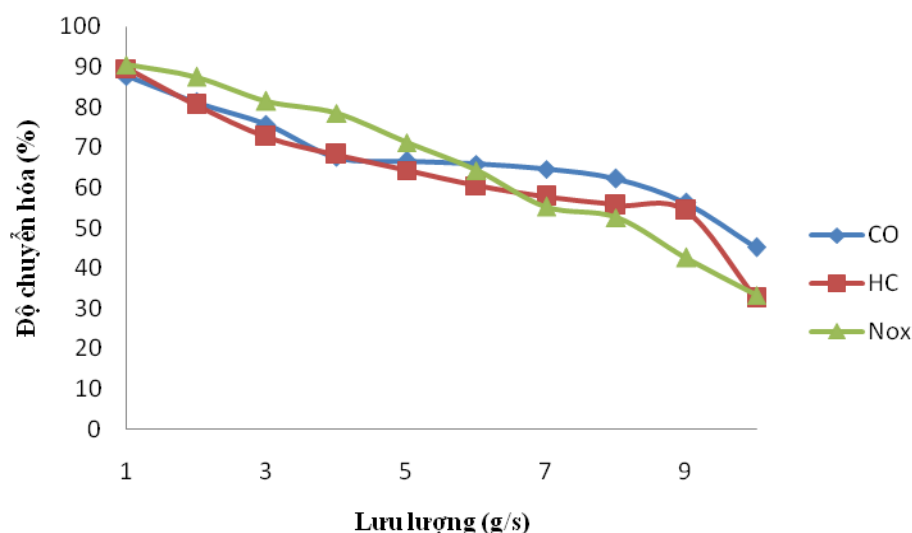
Thông số lưu lượng khí thải đi vào bộ xúc tác ba thành phần được lấy từ lưu lượng khí thải thực tế của xe máy được đo tại phòng thí nghiệm. Kết quả mô phỏng hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khi thay đổi lưu lượng khí thải được thể hiện trong bảng 3.9

*Bảng 3.8. Hiệu quả của bộ xúc tác khi thay đổi lưu lượng khí thải*

Lưu lượng khí thải (g/s)	Độ chuyển hóa của các chất khí (%)		
	CO	HC	NO <sub>x</sub>
1	87.68	89.53	90.56
2	81.23	80.56	87.54
3	75.58	72.61	81.52
4	67.52	68.25	78.45
5	66.57	64.25	71.23
6	65.87	60.45	64.23
7	64.54	57.86	55.28
8	62.23	55.67	52.55
9	56.23	54.32	42.56
10	45.15	32.54	33.35

Nhìn vào bảng 3.9 ta thấy rằng khi càng tăng lưu lượng thì độ chuyển hóa càng giảm. Lý do là vì các phản ứng chuyển đổi xảy ra trong bề mặt các lỗ rỗng của khối xúc tác mà khi ta càng tăng lưu lượng mà độ mở bề mặt của khối xúc tác không thay đổi thì lượng khí thải sẽ bị thất thoát do tiếp xúc với các thành của khối xúc tác dẫn đến độ chuyển hóa sẽ bị giảm đi

Xu hướng chuyển hóa của các chất khí gây ô nhiễm khi thay đổi lưu lượng dòng khí thải đi vào bộ xúc tác được minh họa cụ thể trên hình 3.10



Hình 3.10. Hiệu quả của bộ xúc tác khi thay đổi lưu lượng

### 3.4.2. Đánh giá hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khi thay đổi số cell của bộ xúc tác

Kết quả mô phỏng hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần sau khi thay đổi số cell của bộ xúc tác ba thành phần được thể hiện trong bảng 3.10

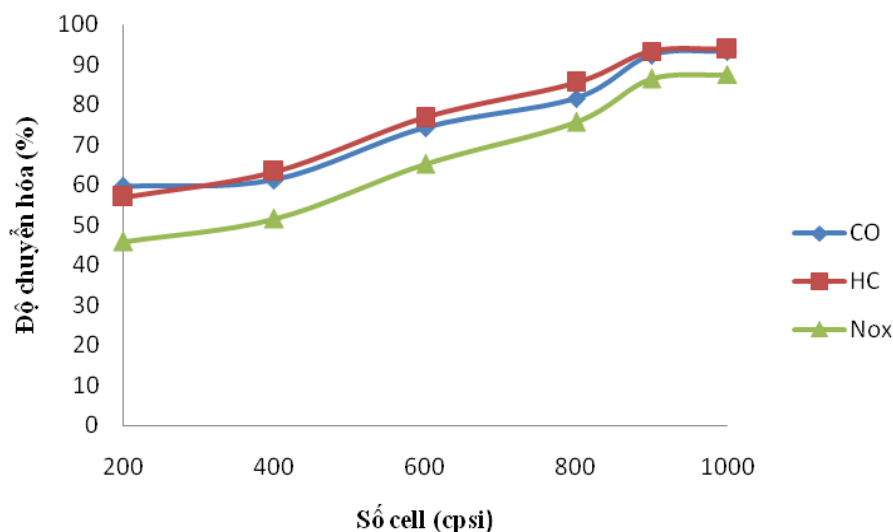
Bảng 3.9. Hiệu quả của bộ xúc tác khi thay đổi số cell của bộ xúc tác

Số cell trong bộ xúc tác	Độ chuyển hóa của các chất khí (%)		
	CO	HC	NO <sub>x</sub>
200	59.58	56.9	45.9
400	61.21	63.32	51.56
600	74.23	76.71	65.23
800	81.56	85.45	75.61
900	92.34	93.25	86.45
1000	93.31	93.75	87.56

Nhìn vào bảng 3.10 ta thấy rằng khi càng tăng số cell thì độ chuyển hóa càng tăng nguyên nhân là do các phản ứng chuyển hóa các chất gây ô nhiễm diễn ra bên trên lớp washcoat được phủ bên trên bề mặt các lỗ của khối xúc tác. Khi bề mặt các lỗ càng mở rộng nghĩa là lưu lượng khí thải dễ dàng đi vào bộ xúc tác

hơn để thực hiện phản ứng chuyển hóa chất gây ô nhiễm và tránh được việc thất thoát lượng khí thải khi tiếp xúc với thành khối xúc tác.

Độ chuyển hóa của các chất khí gây ô nhiễm khi đi vào bộ xúc tác nếu thay đổi số cell sẽ được mô tả rõ hơn ở hình 3.11



Hình 3.11. Hiệu quả của bộ xúc tác khi thay đổi số cell

### 3.4.3. Đánh giá hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khí thay đổi nhiệt độ

Kết quả mô phỏng hàm lượng khí thải trước và sau khi đi vào bộ xúc tác ba thành phần sau khi thay đổi nhiệt độ khí thải được thể hiện trong bảng 3.10

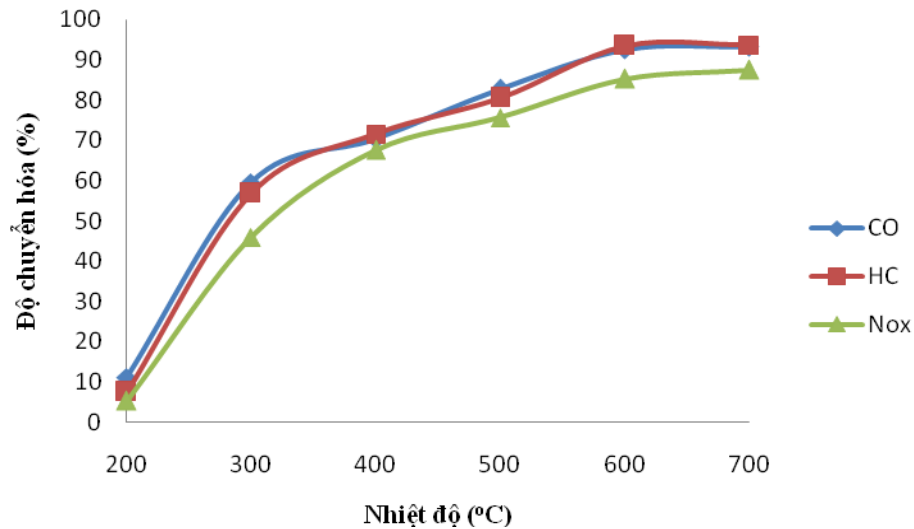
Bảng 3.10. Độ chuyển hóa của các thành phần khí thải khi thay đổi nhiệt độ khí thải

Nhiệt độ khí thải (°C)	Độ chuyển hóa của các chất khí (%)		
	CO	HC	NO <sub>x</sub>
200	11.21	7.52	5.32
300	59.58	56.9	45.9
400	70.23	71.5	67.56
500	82.7	80.6	75.6
600	92.5	93.42	85.23
700	93.2	93.7	87.52

Nhìn vào bảng 3.11 ta thấy rằng khi càng tăng nhiệt độ thì độ chuyển hóa càng tăng nguyên nhân do tốc độ của các phản ứng giữa chất xúc tác và chất gây ô nhiễm có dạng  $r = K \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T}}$ . Khi ta càng tăng nhiệt độ thì tốc độ của các phản

ứng giữa chất xúc tác và chất gây ô nhiễm càng tăng dẫn đến việc chuyển hóa được nhiều chất gây ô nhiễm hơn.

Độ chuyển hóa của các chất khí gây ô nhiễm khi đi vào bộ xúc tác nếu thay đổi nhiệt độ sẽ được mô tả rõ hơn ở hình 3.12



Hình 3.12. Hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khí thay đổi nhiệt độ

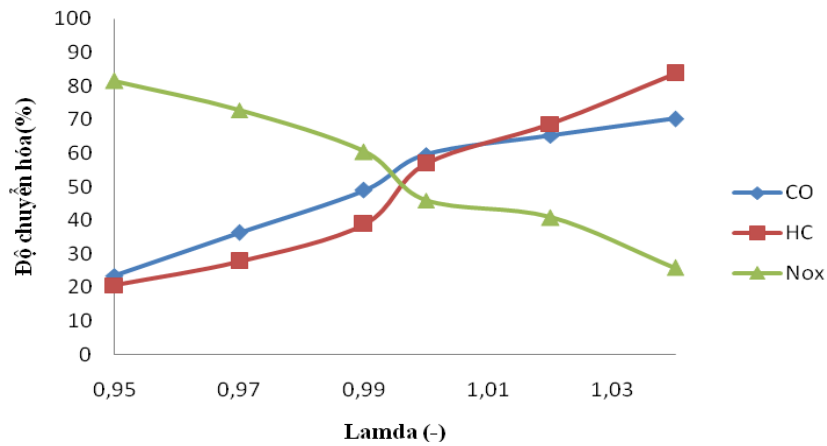
#### 3.4.4. Đánh giá hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khí thay đổi lamda

Kết quả mô phỏng hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khí thay đổi lamda được thể hiện trong bảng 3.11

Bảng 3.11. Hiệu quả của bộ xúc tác khí thay đổi lamda

Lamda (-)	Độ chuyển hóa của các chất khí (%)		
	CO	HC	NO <sub>x</sub>
0.95	23.56	20.61	81.52
0.97	36.32	27.7	72.8
0.99	48.9	38.86	60.4
1	59.58	56.9	45.9
1.02	65.2	68.7	40.8
1.04	70.2	83.7	25.8

Độ chuyển hóa của các chất khí gây ô nhiễm khi đi vào bộ xúc tác nếu thay đổi nhiệt độ sẽ được mô tả rõ hơn ở hình 12



Hình 3.13. Hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khi thay đổi lamda

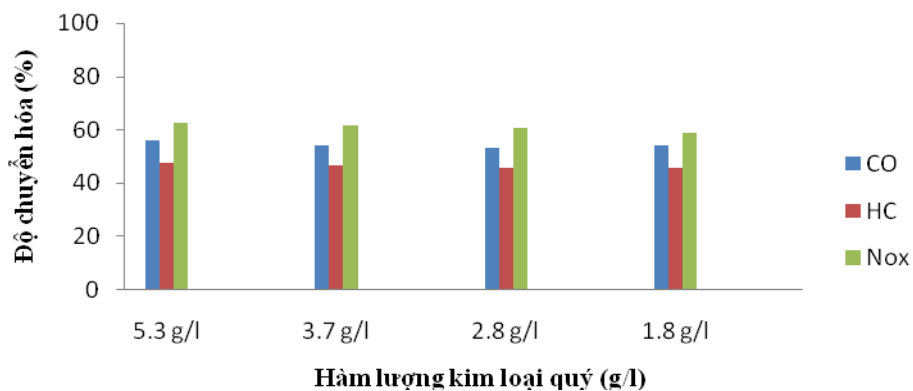
### 3.4.5. Đánh giá hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khi thay đổi hàm lượng kim loại quý

Kết quả mô phỏng hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khi thay đổi hàm lượng kim loại quý được thể hiện trong bảng 3.13

Bảng 3.12. Hiệu quả của bộ xúc tác khi thay đổi hàm lượng kim loại quý

Hàm lượng kim loại quý	Độ chuyển hóa của các chất khí (%)		
	CO	HC	NO <sub>x</sub>
5.3 g/l	56.23	47.64	62.5
3.7 g/l	54.17	46.77	61.49
2.8 g/l	53.12	45.53	60.47
1.8 g/l	54.07	45.89	58.74

Độ chuyển hóa của các chất khí gây ô nhiễm khi đi vào bộ xúc tác nếu thay đổi hàm lượng kim loại quý được mô tả rõ hơn ở hình 12



Hình 3.14. Hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khi thay đổi hàm lượng kim loại quý

## KẾT LUẬN VÀ HƯỚNG PHÁT TRIỂN

Xử lý các thành phần gây ô nhiễm trong khí xả động cơ xăng bằng bộ xúc tác cho thấy là biện pháp có hiệu quả cao và tính khả thi về mặt kỹ thuật lẫn công nghệ và kinh tế, phù hợp với điều kiện của Việt Nam hiện nay.

Phần mềm mô phỏng AVL – BOOST đã trở thành một công cụ thực sự hữu ích trong việc mô phỏng khả năng giảm thiểu khí thải gây ô nhiễm môi trường của bộ xúc tác ba thành phần gắn trên xe máy. Qua các kết quả mô phỏng có thể xác định được hiệu quả của bộ xúc tác khi thay đổi các thông số kỹ thuật của bộ xúc tác và lamda

Hướng phát triển tiếp theo của đề tài là tiến hành các bài toán mô phỏng cho bộ xúc tác ba thành phần gắn trên ô tô.

## **TÀI LIỆU THAM KHẢO**

1. Jan Kaspar, Paolo Fornasiero, Neal Hickey, Automotive catalytic converters: current status and some perspectives, 2003
2. Báo cáo của cục đăng kiểm Việt Nam – năm 2013
3. Phạm Minh Tuấn. Khí thải động cơ đốt trong và Ô nhiễm môi trường. NXB Khoa học và kỹ thuật 2013
4. Phạm Minh Tuấn. Động cơ đốt trong. NXB Khoa học và Kỹ thuật 2006
5. Automotive Three-Way Exhaust Aftertreatment under Transient Conditions - Measurements, Modeling and Simulation, 2006, PhD-Thesis, University of Stuttgart.
6. AVL-BOOST v2013.2 AFTERTREATMENT USERS GUIDE



## MỤC LỤC

MỞ ĐẦU .....	i
CHƯƠNG I TỔNG QUAN ĐỀ TÀI .....	1
1.1 Hiện trạng ô nhiễm môi trường từ phương tiện giao thông .....	1
1.1.1. Đặc điểm phát thải của động cơ đốt trong .....	1
1.1.2. Tình hình ô nhiễm môi trường do khí thải động cơ trên thế giới và ở Việt Nam .....	2
1.2. Các biện pháp giảm ô nhiễm từ khí thải động cơ xăng.....	4
1.2.1. Giảm thành phần độc hại khí thải nhờ tối ưu hóa thiết kế động cơ....	4
1.2.2. Giảm thành phần độc hại bằng biện pháp xử lý khí thải .....	6
1.3. Mục tiêu nghiên cứu của đề tài .....	11
Chương II. NGUYÊN LÝ LÀM VIỆC VÀ CƠ SỞ LÝ THUYẾT MÔ PHỎNG BỘ XÚC TÁC BA THÀNH PHẦN .....	13
2.1. Nguyên lý làm việc của bộ xúc tác ba thành phần.....	13
2.1.1. Cấu tạo bộ xúc tác ba thành phần .....	13
2.1.2 Nguyên lý làm việc của bộ xúc tác .....	15
2.2. Cơ sở lý thuyết mô phỏng bộ xúc tác ba thành phần .....	15
2.2.1. Cơ chế của các phản ứng xúc tác dị thể.....	16
2.2.2. Tỷ số lamda .....	17
2.2.3. Đặc điểm của lỗ rỗng trong khối xúc tác có cấu trúc dạng tổ ong ...	17
2.3. Phương trình cân bằng .....	17
2.3.1. Truyền nhiệt và định luật Fourier .....	19
2.3.2. Nhiệt động lực học trong các lỗ của khối xúc tác.....	19
2.3.3. Nhiệt động lực học và đặc điểm truyền nhiệt .....	20
2.4. Sự khuếch tán trong lớp washcoat .....	22
2.4.1. Mô hình khuếch tán.....	22
2.5.1. Hệ số bám.....	22
Chương III. MÔ PHỎNG BỘ XÚC TÁC BA THÀNH PHẦN LẮP TRÊN XE MÁY .....	24
3.1. Giới thiệu phần mềm.....	24
3.2. Xây dựng mô hình.....	26
3.2.1. Nhập dữ liệu cho mô hình.....	27
3.3. Chạy mô hình .....	30

3.4. Kết quả mô phỏng .....	31
3.4.1. Đánh giá hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khi thay đổi lưu lượng khí thải .....	32
3.4.2. Đánh giá hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khi thay đổi số cell của bộ xúc tác .....	33
3.4.3. Đánh giá hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khi thay đổi nhiệt độ .....	34
3.4.4. Đánh giá hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khi thay đổi lamda .....	35
3.4.5. Đánh giá hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần khi thay đổi hàm lượng kim loại quý .....	36
KẾT LUẬN VÀ HƯỚNG PHÁT TRIỂN .....	37
TÀI LIỆU THAM KHẢO .....	38