

مدل سازی عددی نوین برای پیش بینی دقیق و بهینه سازی عملکرد مبدل های کاتالیستی

چکیده: این مطالعه یک مدل عددی برای مبدل های کاتالیستی در متلب توسعه داده که با ترکیب سینتیک پیچیده و انتقال جرم، دقت پیش بینی را افزایش می دهد. برخلاف مدل های ساده، این مدل از واکنش چندگونه ای بهره می برد که رفتار واقعی مبدل را بهتر شبیه سازی می کند. اعتبارسنجی با داده های تجربی نشان داد اختلاف بازده تبدیل برای متان، مونوکسید کربن و اکسید نیتروژن به ترتیب به 8.72% ، 5.00% و 12.6% کاهش یافته است. پارامترهایی مانند دبی حجمی، طول مبدل و غلظت اکسیژن تأثیر زیادی بر عملکرد دارند. افزایش دبی از 0.05 به 1 متر مکعب بر ثانیه در دمای 500 کلوین باعث کاهش راندمان و افزایش دمای روشن شدن بیش از 80 کلوین شد. افزایش طول مبدل از 0.05 به 0.3 متر در دمای 550 کلوین، راندمان تبدیل مونوکسید کربن و اکسید نیتروژن را بیش از 40% بهبود داد. افزایش غلظت اکسیژن تبدیل مونوکسید کربن و متان را افزایش داد؛ اما کاهش اکسید نیتروژن را کاهش داد. افزایش غلظت مونوکسید کربن در گاز خروجی، دمای روشن شدن متان و مونوکسید کربن را افزایش و دمای روشن شدن اکسید نیتروژن را کاهش داد. کنترل غلظت مونوکسید کربن و بهینه سازی طول مبدل عملکرد را بهبود می دهد، هرچند افزایش طول مبدل ممکن است هزینه و افت فشار را بالا ببرد.

واژه های راهنما: مبدل کاتالیستی، مدل سازی عددی، سینتیک واکنش، انتقال جرم، بهینه سازی عملکرد

میر ابوالفضل مختاری*

دانشیار،
دانشکده مهندسی و پرواز،
دانشگاه امام علی (ع)، تهران

میثم جلالوند

محقق مستقل، کارشناس معاونت
تحقیقات و جهاد خودکفایی
هوانیروز، تهران

مهدی سعادت پور

محقق مستقل،
کارشناس ارشد مهندسی شیمی،
گرایش طراحی فرآیند، تهران

مقاله علمی پژوهشی

دریافت: ۱۴۰۴/۰۱/۲۳

بازنگری: ۱۴۰۴/۰۳/۰۹

پذیرش: ۱۴۰۴/۰۶/۳۱

Abolfazl Mokhtari*

Associate Professor,
Flight and Engineering
Department, Imam Ali
University, Tehran

Meysam Jalalvand

Independent Researcher &
Expert of the Deputy of
Research and Self-
sufficiency Army Aviation,
Tehran

Mahdi Saadati pour

Independent Researcher &
Expert of Chemical
Engineering Process Design,
Tehran

Advanced numerical modeling for accurate prediction and optimization of catalytic converter performance

Abstract: This study develops a one-dimensional numerical model for catalytic converters implemented in MATLAB, integrating complex reaction kinetics and mass transfer to enhance predictive accuracy. Unlike simplified models, the proposed framework employs multi-species reaction mechanisms, enabling a more precise simulation of real converter behavior. Validation against experimental data demonstrated reductions in the discrepancy of conversion efficiencies for methane, carbon monoxide, and nitrogen oxide to 8.72%, 5.00%, and 12.6%, respectively. Key operational parameters—including volumetric flow rate, converter length, and oxygen concentration—significantly influence performance. Increasing the flow rate from 0.05 to 1 m³/s at 500 K decreased conversion efficiency and raised light-off temperature by over 80 K. Extending the converter length from 0.05 to 0.3 m at 550 K enhanced carbon monoxide and nitrogen oxide conversion efficiencies by more than 40%. Higher oxygen concentrations improved methane and carbon monoxide conversion but reduced nitrogen oxide reduction efficiency. Additionally, elevated carbon monoxide levels in the exhaust increased the light-off temperatures of methane and carbon monoxide while lowering that of nitrogen oxide. These findings suggest that controlling carbon monoxide concentration and optimizing converter length can substantially improve catalytic performance, though longer converters may increase cost and pressure drop.

Keywords: Waste energy recovery, Steam, Ejector, Suction ratio, Condensate tank

۱- مقدمه

متان و بهبود فرآیند کاتالیستی می‌شود [۱۷]. وانگ و همکاران روش‌های حذف متان در موتورهای گاز طبیعی را بررسی کردند. مطالعه آن‌ها نشان داد که تغییر شکل با بخار موجب بهبود احتراق متان می‌شود. این نتایج از طریق شبیه‌سازی عددی به دست آمد [۱۸]. بونه‌شادا و همکاران عملکرد کاتالیست سریم-زیرکونیوم را برای کاهش انتشار متان در گازهای خروجی وسایل نقلیه گازسوز مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان داد که پالس‌های تناوبی غنی در سوخت رقیق، عملکرد پایدار کاتالیست را حفظ می‌کند و نرخ تبدیل متان در شرایط غنی افزایش می‌یابد [۹]. تان و همکاران با استفاده از شبیه‌سازی دینامیکی سیالات محاسباتی تأثیر پارامترهای گاز خروجی را بر عملکرد یک مبدل کاتالیستی پالادیوم-رودیوم در موتورهای سنگین گازسوز تحلیل کردند. نتایج نشان داد که افزایش غلظت کربن مونوکسید در گاز خروجی، بازده تبدیل متان و مونوکسید نیتروژن را به ترتیب ۸/۱٪ و ۴۱/۸٪ در دمای ۶۲۳ کلوین افزایش می‌دهد. این مطالعه غلظت اکسیژن در گاز خروجی را به‌عنوان مؤثرترین عامل در بازده تبدیل متان و کربن مونوکسید شناسایی کرد، در حالی که برای تبدیل مونوکسید نیتروژن، غلظت کربن مونوکسید مهم‌ترین پارامتر بود. دقت مدل‌سازی در مقایسه با داده‌های تجربی برای بازده تبدیل متان، کربن مونوکسید و نیتروژن مونوکسید به ترتیب ۲۰/۶٪، ۱۸/۳٪ و ۱۸/۹٪ گزارش شد [۱۰]. در مطالعه‌ای مشابه، تان و همکاران با استفاده از یک مدل عددی سه‌بعدی، تأثیر پارامترهای ساختاری بر عملکرد یک مبدل کاتالیستی حاوی پالادیوم-رودیوم را برای موتورهای سنگین گازسوز بررسی کردند. افزایش تراکم مبدل کاتالیستی و کاهش ضخامت دیواره، تأثیر مثبتی بر بازده تبدیل داشت. در این مطالعه قطر مبدل به‌عنوان مهم‌ترین عامل شناسایی شد. دقت این مدل‌سازی مانند مطالعه قبل بود [۱۱].

مطالعات دیگر نشان می‌دهند که ترکیب گازهای خروجی در موتورهای گاز طبیعی بر عملکرد مبدل کاتالیستی سه‌گانه تأثیرگذار است و حفظ شرایط بهینه موتور، عامل کلیدی در افزایش کارایی این فرآیند محسوب می‌شود. ژانگ و همکاران عملکرد یک موتور گازسوز سنگین را تحت شرایط استوکیومتری بررسی کردند. آزمایش‌های آن‌ها نشان داد که در تست‌های راه‌اندازی گرم، میزان انتشار کربن مونوکسید و هیدروکربن‌ها افزایش می‌یابد، درحالی‌که در راه‌اندازی سرد، میزان انتشار مونوکسید نیتروژن بیشتر است. این یافته‌ها نشان می‌دهند که بهبود عملکرد کاتالیست به‌دلیل انتشار بیش‌ازحد متان، امری

با پیشرفت فناوری، موتورهای احتراق داخلی بسیار اهمیت یافته‌اند. با این حال، نمی‌توان از تأثیرات زیست‌محیطی آن‌ها چشم‌پوشی کرد. برای مقابله با این چالش، استفاده از مبدل‌های کاتالیستی به‌عنوان راهکاری شناخته‌شده برای کاهش انتشار گازهای مضر از فرآیندهای احتراق به‌کار می‌رود [۱]. مبدل‌های کاتالیستی دستگاه‌های کنترل انتشار هستند که به‌طور معمول در خودروها و دیگر موتورها استفاده می‌شوند. هدف آن‌ها کاهش سطح آلاینده‌های مضر، از جمله گازهای گلخانه‌ای مانند مونوکسیدکربن، اکسیدهای گوگرد و اکسیدهای نیتروژن در گازهای خروجی قبل از انتشار به جو است [۲].

گازهای گلخانه‌ای اصلی که توسط مبدل‌های کاتالیزوری کاهش می‌یابند شامل مونوکسیدکربن، اکسید نیتروژن و هیدروکربن‌ها هستند تا از تولید موادی مانند نیتروژن در اکسید^۱ و آمونیاک^۲ جلوگیری شود. مبدل‌هایی که مسئول کاهش این سه گاز گلخانه‌ای هستند، به‌عنوان مبدل کاتالیزوری سه‌گانه شناخته می‌شوند. مبدل کاتالیستی طی سال‌ها فرآیندها و تحولات مهمی را پشت سر گذاشته‌است.

در پاسخ به مقررات سختگیرانه زیست‌محیطی، در مورد موتورهای احتراق داخلی تحقیقات زیادی در مورد سیستم مبدل کاتالیستی انجام شده است تا بتوانند به‌طور جداگانه یا همزمان آلاینده‌هایی همچون هیدروکربن نسوخته، ناکس و کربن مونوکسید را از آگروز موتورهای احتراق حذف کنند [۳]. این شامل توسعه مدل برای مبدل‌های کاتالیستی است که به‌طور جامع شیمی کاتالیستی را در سطح مولکولی توصیف می‌کند [۴]. در ادامه مطالعاتی که بر روی این مبدل‌های کاتالیستی صورت گرفته است، بیان می‌شود.

برخی تحقیقات برای افزایش تبدیل متان بر اساس استوکیومتری انجام شده‌است. گونگ و همکاران به بررسی ترکیب موجود در سوخت بر عملکرد یک کاتالیست سه‌گانه پرداختند. آن‌ها دریافتند که تبدیل مونوکسید نیتروژن و متان به یکدیگر وابسته هستند. در این مطالعه غلظت اکسیژن یک عامل مهم برای ارزیابی عملکرد مبدل کاتالیستی عنوان شد [۶]. فری و همکاران احتراق متان را در یک مبدل کاتالیستی بررسی کردند. آن‌ها دریافتند که عملکرد در چرخه‌های غنی یا رقیق باعث بهبود کارایی احتراق متان می‌شود. این اثر به‌ویژه در شرایط تمایل به سمت غنی مشهودتر است و منجر به افزایش نرخ تبدیل

² NH₃¹ N₂O

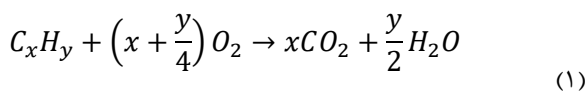
جرم، رفتار واقعی مبدل‌ها را با دقت بالایی شبیه‌سازی کند. مهم‌ترین دستاوردها و نوآوری‌های این تحقیق عبارتند از: توسعه یک مدل جامع که تأثیر همزمان پارامترهای عملیاتی (از جمله دبی جریان و ترکیب گاز ورودی) و مشخصات فیزیکی مبدل (مانند طول آن) را بررسی می‌کند تأیید اعتبار مدل با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی که حاکی از دقت قابل قبول است. شناسایی روابط جدید بین پارامترهای مؤثر مانند تأثیر غیرخطی تغییرات غلظت مونوکسیدکربن بر عملکرد سیستم نتایج این مطالعه می‌تواند راهنمای ارزشمندی برای طراحی بهینه مبدل‌های کاتالیستی با در نظر گرفتن توأمان جنبه‌های فنی و اقتصادی باشد. به‌طور خاص، مدل حاضر با بهره‌گیری از چارچوب واکنش چندگونه و در نظر گرفتن دقیق‌تر انتقال جرم، عملکرد دقیق‌تری در پیش‌بینی بازدهی مبدل کاتالیستی تحت شرایط مختلف عملیاتی مانند تغییرات نرخ جریان حجمی، غلظت اکسیژن، غلظت CO و طول مبدل ارائه می‌دهد.

۲- مدل‌سازی

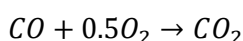
در این قسمت نحوه مدل‌سازی سیستم مورد مطالعه به تفصیل بیان شده است. معادلاتی که در این قسمت به کار می‌آیند، معادلات پیوستگی، انرژی، نرخ واکنش‌ها، ممنوم و معادلات حالت است.

۲-۱- واکنش‌های موجود

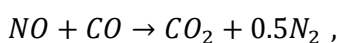
درون یک مبدل کاتالیستی واکنش‌های زیادی انجام می‌شود. با توجه به کیفیت سوخت موجود می‌توان از ترکیبات مضر سوخت که شامل گوگرد و سرب است، صرف‌نظر کرد، اما در مدل‌سازی به‌دلیل پیچیدگی‌های موجود، تمام معادلات را در نظر نمی‌گیرند و تنها سه واکنش مهم را در نظر می‌گیرند که در معادلات (۱) تا (۳) آورده شده‌اند [۱۹].



$$\Delta H = -2490 \frac{kJ}{mole}$$



$$\Delta H = -283 \frac{kJ}{mole} \quad (2)$$



$$\Delta H = -2630 \frac{kJ}{mole} \quad (3)$$

ضروری است [۱۲]. هاتر و همکاران تأثیر غلظت کربن مونوکسید را بر احتراق متان در موتورهای بررسی کردند. آن‌ها دریافته‌اند که در شرایط احتراق استوکیومتری، حضور کربن مونوکسید موجب افزایش دما شده و واکنش اکسیداسیون کاتالیستی را تسریع می‌کند. با استفاده از روش‌های تجربی، آن‌ها یک مدل کنترلی برای پیش‌بینی بازده تبدیل متان در شرایط رقیق توسعه دادند. این مطالعه نتیجه‌گیری کرد که کربن مونوکسید موجود در گازهای خروجی به کاهش انتشار متان کمک می‌کند [۱۳]. آوینن و همکاران دریافته‌اند که مبدل‌های کاتالیستی هیبریدی قادر به تبدیل بیش از ۹۰٪ متان هستند؛ اما مقدار بیشتری آمونیاک تولید می‌کنند. مطالعه آن‌ها نشان داد که کاتالیست‌های مرتبط با موتور دیزلی و کاتالیست‌های مرتبط با موتور با سوخت متان در محدوده گسترده‌ای از غلظت اکسیژن قابلیت احیا دارند، درحالی‌که مبدل‌های کاتالیستی سه‌گانه برای عملکرد بهینه به سطح پایینی از اکسیژن نیاز دارند [۱۴]. ژانگ و همکاران انتشار آمونیاک در موتورهای گاز طبیعی را بررسی کردند و تأثیر نسبت هوا به سوخت و سرعت موتور را در شرایط پایدار مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها دریافته‌اند که انتشار آمونیاک در نسبت هوا به سوخت ۰/۹۶ نسبت به حداکثر مقدار خود می‌رسد و تحت تأثیر میزان اولیه انتشار کربن مونوکسید و اکسیدهای نیتروژن قرار دارد [۱۵]. یون و همکاران دریافته‌اند که فناوری احتراق در اتوبوس‌های مجهز به مبدل کاتالیستی سه‌گانه، میزان ترکیبات آلی فرار و کربونیل‌ها را بیش از ۹۹٪ در مقایسه با اتوبوس‌های بدون مبدل کاتالیستی کاهش می‌دهد [۱۶]. ژانگ و همکاران انتشار آلاینده‌ها را در یک موتور گازسوز بر اساس احتراق استوکیومتری با استفاده از دو نوع سوخت مرجع بررسی کردند. آن‌ها دریافته‌اند که سوخت با ارزش حرارتی بالا باعث کاهش انتشار هیدروکربن، مونوکسیدکربن و اکسیدهای نیتروژن می‌شود؛ اما در بارهای بالا میزان انتشار این آلاینده‌ها در مقایسه با سوخت‌های با ارزش حرارتی پایین افزایش می‌یابد [۱۷]. در مطالعه‌ای دیگر، ژانگ و همکاران تأثیر مبدل کاتالیستی سه‌گانه مبتنی بر پالادیوم-سرب اکسید را بر میزان انتشار آلاینده‌ها در یک موتور بنزینی ارزیابی کردند. آن‌ها انتشار هیدروکربن، کربن مونوکسید و نیتروژن مونوکسید را همراه با دمای گازهای خروجی و مصرف ویژه سوخت بررسی کردند [۱۸].

این پژوهش به توسعه یک مدل ریاضی پیشرفته برای تحلیل عملکرد مبدل‌های کاتالیستی پرداخته است. مدل ارائه شده که در محیط نرم‌افزاری متلب پیاده‌سازی شده، قادر است با در نظر گرفتن سینتیک کامل واکنش‌های شیمیایی و پدیده‌های انتقال

۲-۲- فرضیات

$$(1 - \varepsilon)k_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial X^2} - hG_A(T_g - T_s) - \sum_{i=1}^{N_g} \Delta H_i R_i = 0 \quad (7)$$

همچنین معادله جرم در فاز جامد نیز مطابق معادله (۸) محاسبه می‌شود [۲۱].

$$k_{m,j}G_A(C_{g,j} - C_{s,j}) - R_j = 0 \quad (8)$$

ضریب انتقال جرم در مبدل کاتالیستی مطابق معادله (۹) بدست می‌آید [۲۲].

$$k_{m,i} = Sh_{\infty} \frac{D_{i,j}}{D_H} \quad (9)$$

در معادله فوق Sh_{∞} عدد شرود است که برابر $2/89$ در نظر گرفته شده است. $D_{i,j}$ ضریب پخش جرمی گونه‌ها، D_H نیز قطر هیدرولیکی است. پارامتر بعدی، ضریب انتقال حرارت جابجایی است که مطابق عدد ناسلت بدست می‌آید. یعنی:

$$h = \frac{Nu_{\infty} \lambda_g}{D_h} \quad (10)$$

که در معادله فوق [۲۳]:

$$\lambda_g = 0.0241 \left(\frac{T_s + T_g}{2} \right)^{0.8} \quad (11)$$

در این مدل‌سازی عدد ناسلت نیز برابر $2/89$ در نظر گرفته شده است [۲۳]. سه معادله (۱۲) تا (۱۴) نرخ واکنش‌های شیمیایی صورت گرفته را نشان می‌دهد [۲۴].

$$R_{HC} = \frac{k_{HC} X_{HC} X_{O_2}}{G_1} \quad (12)$$

$$R_{CO} = \frac{k_{CO} X_{CO} X_{O_2}}{G_1} + k_{CO} X_{NO}^{0.5} X_{CO}^m \quad (13)$$

$$R_{NO} = k_{NO} X_{NO}^{0.5} X_{CO}^m \quad (14)$$

که X غلظت است. همچنین ضریب سرعت واکنش نیز مطابق معادله (۱۵) محاسبه می‌شود [۲۵].

$$\lambda_g = 0.0241 \left(\frac{T_s + T_g}{2} \right)^{0.8} \quad (15)$$

فرضیات ساده شونده و همچنین معادلات مرزی در نظر گرفته شده در این مطالعه در زیر توضیح داده شده است:

- حل معادلات حاکم در حالت تک بعدی انجام شده است.
- محاسبات در حالت پایا انجام شده است.
- چگالی گاز در هنگام عبور از مبدل کاتالیزوری ثابت در نظر گرفته شده است.
- دمای دیواره کانال‌های مبدل کاتالیزوری به صورت خطی در امتداد طول کانال تغییر می‌کند.
- با روش تفاضل پسین، گسسته‌سازی صورت گرفته است.

۲-۳- معادلات حاکم

تحقیقات صورت گرفته بر روی مبدل‌های کاتالیستی نشان می‌دهد که مدل‌سازی یک بعدی و چند بعدی بر روی پیش بینی عملکرد مبدل‌های کاتالیستی تأثیر چندانی ندارد. در مدل‌های یک‌بعدی از تغییرات در راستای شعاع صرف‌نظر می‌شود و صرفاً تغییرات بر راستای محور در نظر گرفته می‌شود. علت معقول بودن این فرض این است که راستای محوری یک مبدل کاتالیستی چند برابر راستای شعاعی مبدل است؛ به طوری که شعاع مبدل‌ها در حد میکرون و راستای محوری در حد سانتی‌متر است. در ادامه معادلات حاکم بر این مبدل کاتالیستی شرح داده شده است. در یک مبدل کاتالیستی معادله (۴) معادله پیوستگی جرم را نشان می‌دهد [۲۰]:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0 \quad (4)$$

که در آن ρ ، چگالی و u سرعت در راستای محوری است. معادله (۵) معادله انرژی در فاز گاز است [۲۱].

$$u \rho_g C_{p,g} \frac{\partial T_g}{\partial x} + hG_A(T_g - T_s) = 0 \quad (5)$$

که h و G_A ضریب انتقال حرارت جابجایی و مساحت تعویض جز است. همچنین معادله جرم در فاز گاز در معادله (۶) بیان شده است.

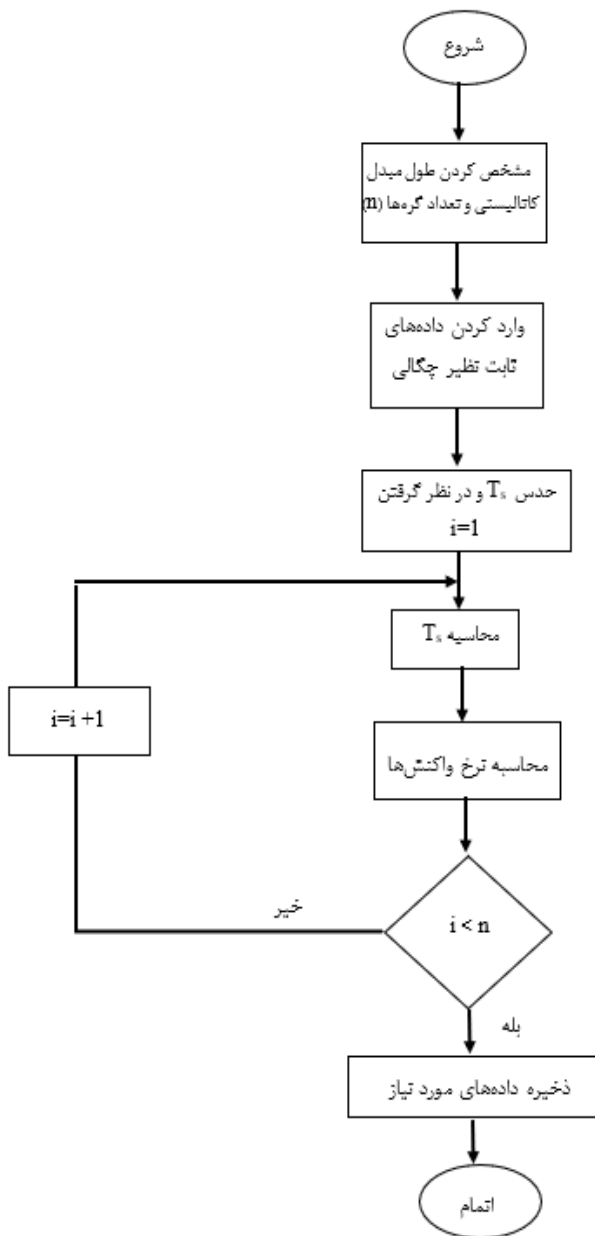
$$u \frac{\partial C_{g,j}}{\partial X} + k_{m,j}G_A(C_{g,j} - C_{s,j}) = 0 \quad (6)$$

که در این معادله، C غلظت و k_m ضریب انتقال جرم است. همچنین در معادله (۷) انرژی در فاز جامد نیز در معادله بعدی آورده شده است.

وسیله نقلیه، زمانی که آلاینده‌ها معمولاً بیشتر است، مهم است [۲۹].

۲-۴- روند حل

در این بخش، روند حل عددی مدل مبدل کاتالیستی در محیط نرم‌افزار MATLAB به صورت گام‌به‌گام تشریح شده است. ابتدا طول مبدل و تعداد گره‌ها به عنوان پارامترهای شبکه‌بندی تعیین می‌شوند؛ زیرا افزایش تعداد گره‌ها موجب بهبود دقت محاسبات می‌شود. سپس پارامترهای ثابت مدل مانند چگالی، ظرفیت حرارتی ویژه و غلظت‌های ورودی مواد وارد سیستم می‌شوند.



شکل ۱ روند حل مطالعه

که A ضریب فعالیت، $E_{a,j}$ انرژی فعال‌سازی است. همچنین R ثابت جهانی گاز است. ضریب بعدی که باید از معادلات استخراج شود و m است که مطابق دو معادله (۱۶) و (۱۷) قابل محاسبه است [۲۶].

$$G_1 = T_s(1 + ka_1X_{CO} + ka_2X_{HC})^2 + (1 + ka_3X_{CO}^2X_{HC}^2)(1 + ka_4X_{NO}^{0.7}) \quad (16)$$

$$m = -0.19(1 - 6.26e^{-m_1X_{CO}}) \quad (17)$$

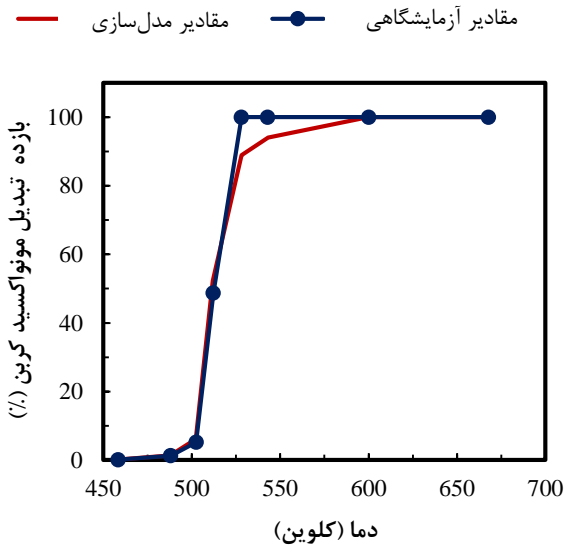
مقدار m_1 برابر ۳۰۰ در نظر گرفته می‌شود [۲۶]. پارامتر مهم دیگری که در مدل‌سازی مبدل‌های کاتالیزوری مؤثر است، ضریب λ است. این ضریب نشان‌دهنده نسبت سوخت به هوا است. با توجه به غلظت سایر اجزاء، غلظت اکسیژن باید به گونه‌ای تنظیم شود که احتراق در شرایط استوکیومتری انجام شود (λ) نحوه محاسبه و بدست آوردن این ضریب در معادله (۱۸) آورده شده است [۲۷].

$$\lambda = \frac{c_{NO} + 2c_{O_2}}{c_{CO} + \left(2x + \frac{y}{2}\right) 2c_{C_xH_y}} \quad (18)$$

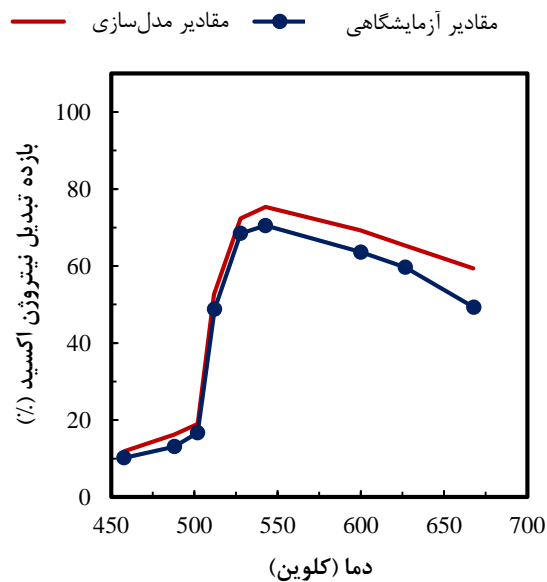
اگر این ضریب کوچکتر از یک باشد مخلوط به اصطلاح غنی و واکنش اکسیداسیون در آن به خوبی انجام نمی‌شود و اگر بزرگتر از یک باشد مخلوط به اصطلاح ضعیف است که نشان‌دهنده اکسیژن زیاد و کاهش است. واکنش به طور کامل رخ نمی‌دهد. در نتیجه، تنظیم اکسیژن نقش مهمی در تجزیه و تحلیل مبدل کاتالیستی ایفا می‌کند. پارامتر مؤثر دیگری که در شناخت عملکرد مبدل کاتالیستی اهمیت دارد، نرخ تبدیل اجزای مختلف است که مطابق معادله (۱۹) محاسبه می‌شود [۲۸].

$$\eta = \frac{C_{out,j} - C_{in,j}}{C_{out,j}} \times 100 \quad (19)$$

در زمینه مبدل‌های کاتالیزوری، دمای رو شن شدن که اغلب به عنوان T50 نشان داده می‌شود یک پارامتر حیاتی است. دمایی است که در آن کاتالیزور به اندازه کافی فعال می‌شود تا ۵۰ درصد از آلاینده‌ها (مانند هیدروکربن‌ها، کربن مونواکسید و نیتروژن اکسید) در گاز خروجی را به مواد کمتر مضر تبدیل کند. دستیابی به دمای پایین‌تر روشن شدن مطلوب است؛ زیرا به این معنی است که مبدل کاتالیزوری پس از روشن شدن موتور شروع به کاهش مؤثر انتشار گازهای گلخانه‌ای سریع‌تر می‌کند که به‌ویژه در مراحل اولیه کارکرد



(ب)



(ج)

شکل ۲ اعتبارسنجی مطالعه برای ضریب تبدیل؛ الف- متان، ب- مونواکسید کربن، ج- نیتروژن اکسید

این اختلاف عمدتاً از عدم قطعیت در سینتیک واکنش، محدودیت‌های انتقال جرم و ساده‌سازی در مدل‌سازی عددی ناشی می‌شوند که با این وجود نسبت مدل‌سازی‌های مقالات دیگر، اختلاف کمتری دارد.

۳-۲- بررسی پارامتری

در این بخش، نتایج حاصل از مدل‌سازی ارائه می‌شود که شامل تأثیر دبی حجمی، طول مبدل کاتالیستی، درصد غلظت اکسیژن

در ادامه، دمای دیواره مبدل در گره اول تخمین زده و با توجه به شرایط، اصلاح می‌شود. سپس در هر گره با استفاده از معادلات انتقال جرم، انرژی و نرخ واکنش، مقادیر دما و غلظت مؤلفه‌ها به صورت تدریجی محاسبه می‌گردد. این روند تا انتهای مبدل ادامه یافته و در نهایت، بازده تبدیل هر مؤلفه ذخیره و گزارش می‌شود. این فرآیند به صورت عددی و با استفاده از روش تفاضل محدود انجام می‌شود تا تعادل بین دقت و زمان محاسبه حفظ گردد که این روند در شکل (۱) آورده شده است.

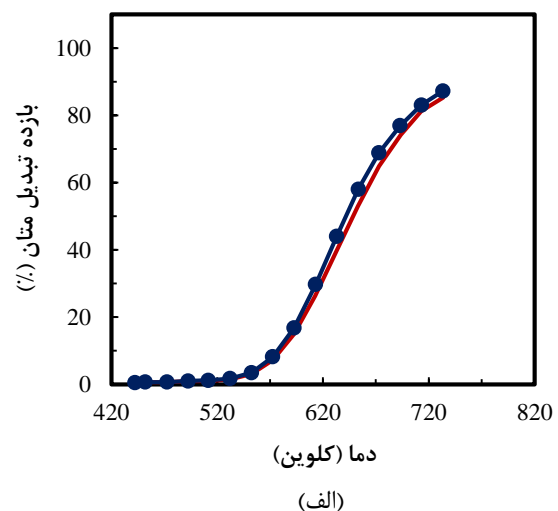
۳- نتایج

در این قسمت از پژوهش، تحلیل نتایج حاصل از مدل‌سازی مورد بررسی قرار می‌گیرد. ابتدا به اعتبارسنجی تحقیق پرداخته می‌شود و سپس نتایج به دست آمده توضیح داده خواهند شد.

۳-۱- اعتبارسنجی

در این قسمت، اعتبارسنجی مبدل کاتالیستی صورت گرفته است. نتایج بدست آمده از نتایج قسمت مدل‌سازی با نتایج تجربی از مطالعات کانگ و همکاران [۳۰] ولی و همکاران [۳۱] برای یک موتور گازی مقایسه شده است. مطابق شکل (۲) راندمان تبدیل مطالعات عددی و تجربی با یکدیگر سازگار است. در این تحقیق بیشترین تفاوت بین مدل‌سازی و داده‌های تجربی برای راندمان تبدیل متان، کربن مونو اکسید و نیتروژن اکسید به ترتیب در دماهای ۶۱۰، ۵۳۰ و ۶۷۰ کلوین است که برابر با ۱۱/۷۴، ۱۱ و ۱۵ درصد است. همچنین میانگین اختلاف متان، کربن مونو اکسید و نیتروژن اکسید به ترتیب ۸/۷۲، ۵/۰۰ و ۱۲/۶۵ درصد است.

مقادیر آزمایشگاهی مقادیر مدل‌سازی

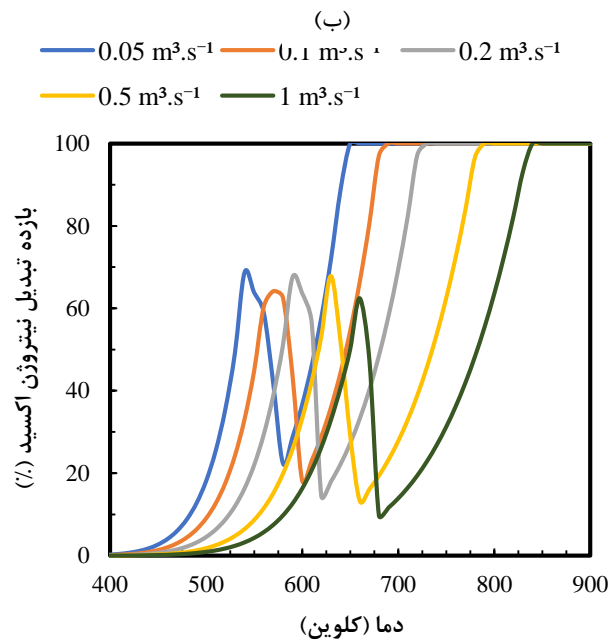
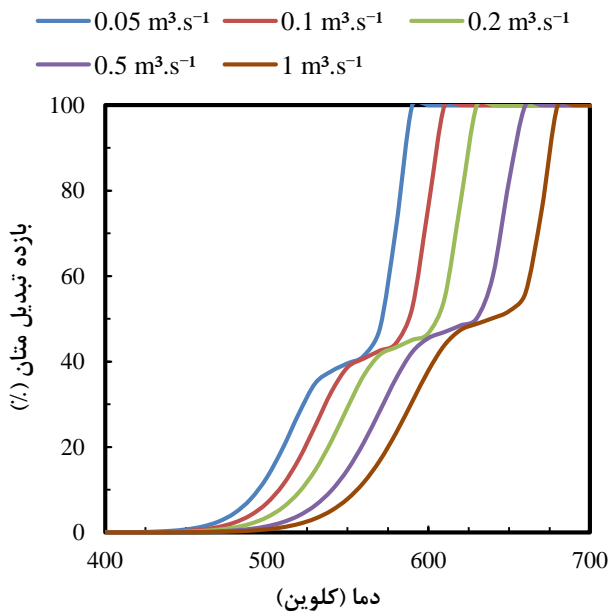


(الف)

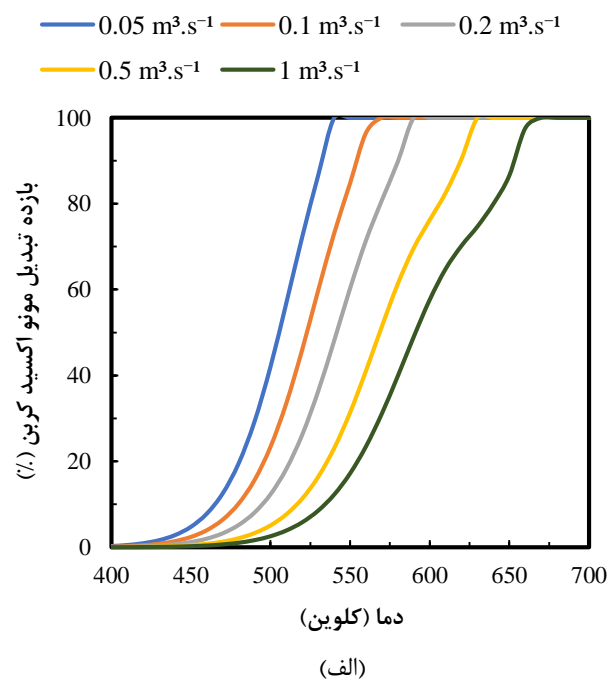
و مونوکسیدکربن بر راندمان تبدیل و دمای روشن شدن یا فعال سازی می باشد.

۳-۲-۱- تأثیرات دبی

شکل (۳) نشان می دهد که چگونه نرخ های مختلف جریان حجمی گاز خروجی بر بازده تبدیل مبدل کاتالیستی سه گانه تحت شرایط استوکیومتری تأثیر می گذارد. نمودارهای بازده تبدیل، الگوی ثابتی را در همه سناریوها نشان می دهند. با افزایش نرخ جریان حجمی گاز خروجی از ۰/۵ متر مکعب بر ثانیه به ۱ متر مکعب بر ثانیه، بازده تبدیل برای متان، مونوکسیدکربن و اکسید نیتروژن به طور پیوسته در دمای ورودی ثابت کاهش می یابد. این کاهش به این دلیل رخ می دهد که با کاهش نرخ جریان گاز خروجی، زمان اقامت گازهای خروجی در داخل مبدل کاتالیستی افزایش می یابد. در نتیجه، واکنش های کاتالیستی فرصت بیشتری برای کامل شدن پیدا می کنند و این موضوع باعث افزایش حذف متان، مونوکسیدکربن و مونوکسید نیتروژن می شود. همچنین، در نرخ جریان حجمی ۱ متر مکعب بر ثانیه، بازده تبدیل برای مونوکسیدکربن، متان و نیتروژن اکسید به ترتیب در دماهای ورودی ۶۷۳ کلوین، ۶۷۳ کلوین و ۸۴۰ کلوین به ۱۰۰ درصد می رسد. این نشان می دهد که در شرایط استوکیومتری، مبدل کاتالیستی سه گانه قادر است متان، مونوکسیدکربن و مونوکسید نیتروژن را در دماهای بالای گاز خروجی به طور کامل حذف کند. با افزایش دمای گاز خروجی، بازده تبدیل مونوکسیدکربن معمولاً بهبود می یابد.

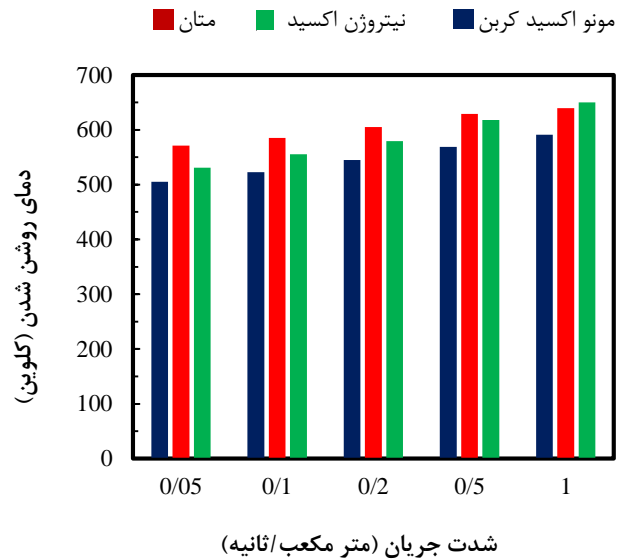
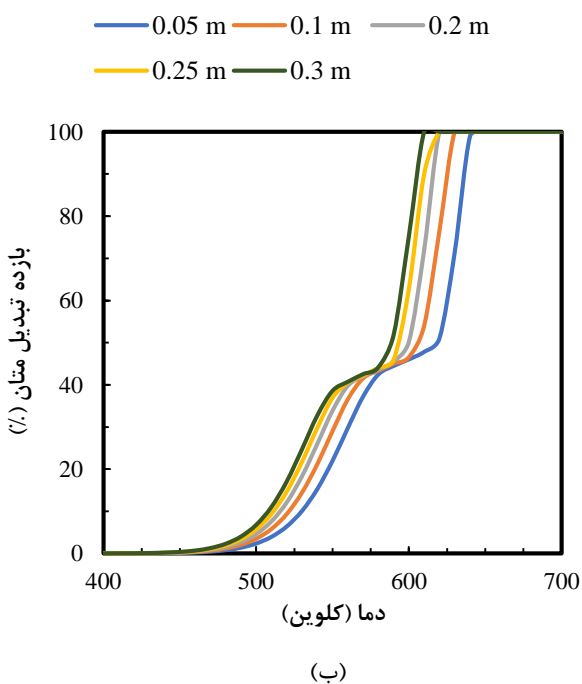
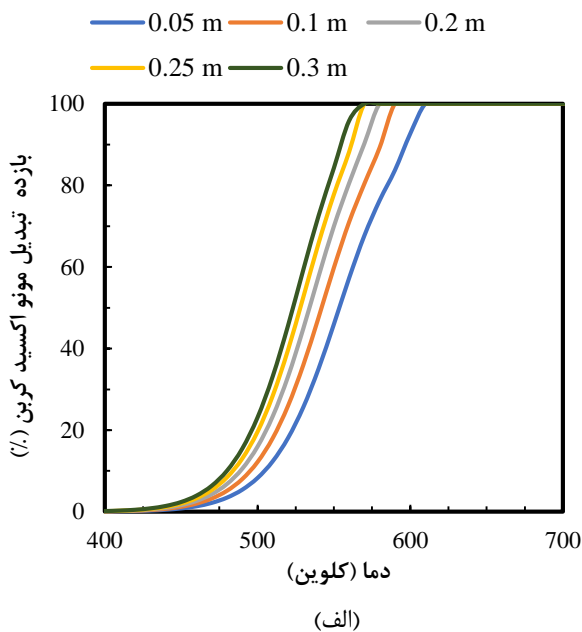


شکل ۳ تأثیر دما بر بازده تبدیل در دبی های حجمی متفاوت؛ الف- مونواکسیدکربن، ب- متان، ج- نیتروژن اکسید
به طور خاص، هنگامی که دمای گاز خروجی به ۴۰۰ کلوین می رسد، بازده تبدیل نیتروژن اکسید ابتدا افزایش پیدا می کند؛ اما با افزایش دمای گاز خروجی به بیش از ۵۴۰ کلوین، بازده تبدیل نیتروژن اکسید شروع به کاهش می کند. در نهایت، با گذر از دمای ۵۹۰ کلوین، بازده تبدیل نیتروژن اکسید دوباره افزایش می یابد و در نرخ جریان ۰/۵ متر مکعب بر ثانیه به ۱۰۰ درصد می رسد. این نوسانات در بازده تبدیل نیتروژن اکسید به دلیل ماهیت دو مرحله ای واکنش های آن است که با یافته های سیو و همکارانش [۳۲] نیز مطابقت دارد.



این بهبود نشان می‌دهد که مبدل‌های طولانی‌تر با فراهم کردن زمان بیشتر برای تماس آلاینده‌ها با کاتالیست، تخریب کامل‌تری از آلاینده‌ها و در نتیجه کنترل بهتر انتشار گازهای گلخانه‌ای را ممکن می‌سازند.

شکل (۶) تأثیر طول مبدل کاتالیستی بر دمای روشن شدن را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با افزایش طول مبدل، دمای روشن شدن برای تمامی آلاینده‌ها کاهش می‌یابد. این کاهش دما به این دلیل است که افزایش طول مبدل منجر به افزایش زمان اقامت گازهای خروجی در محفظه کاتالیستی می‌شود.



شکل ۱ دمای فعال‌سازی در شدت جریان‌های متفاوت حجمی

شکل (۴) دمای روشن شدن را در نرخ‌های مختلف جریان حجمی نشان می‌دهد. با افزایش نرخ جریان خروجی، دمای مورد نیاز برای دستیابی به ۵۰ درصد بازده تبدیل نیز افزایش می‌یابد. به‌طور خاص، در نرخ جریان ۰/۰۵ متر مکعب بر ثانیه، دمای روشن شدن برای متان، مونوکسید کربن و مونوکسید نیتروژن به ترتیب ۵۷۰/۹ کلوین، ۵۰۵ کلوین و ۵۳۰/۹ کلوین است. این دماها برای نرخ جریان ۱ متر مکعب بر ثانیه به ترتیب به ۶۳۹/۸ کلوین، ۵۹۱/۲ کلوین و ۶۵۰ کلوین افزایش می‌یابند. این افزایش دما با افزایش نرخ جریان خروجی به دلایل کاهش زمان اقامت و کاهش انتقال حرارت رخ می‌دهد.

۳-۲-۲- تأثیرات طول مبدل کاتالیستی

شکل (۵) تأثیر طول‌های مختلف مبدل کاتالیستی را بر بازده تبدیل کربن‌مونوکسید، متان و نیتروژن اکسید نشان می‌دهد. طول مبدل کاتالیستی تأثیر قابل توجهی بر بازده تبدیل آلاینده‌ها دارد، زیرا با تغییر زمان اقامت گازهای خروجی در محفظه کاتالیستی، میزان برخورد و واکنش آلاینده‌ها با سطح کاتالیست تغییر می‌کند. افزایش طول مبدل باعث افزایش زمان تماس آلاینده‌ها با کاتالیست شده و به تکمیل بهتر واکنش‌های شیمیایی منجر می‌شود. همان‌طور که در شکل (۵) مشاهده می‌شود، با افزایش طول مبدل از ۰/۰۵ متر به ۰/۳ متر، بازده تبدیل مونواکسید کربن، متان و نیتروژن اکسید بهبود می‌یابد. به‌عنوان مثال، در دمای ۵۵۰ کلوین و طول ۰/۳ متر، بازده تبدیل مونواکسید کربن به ۸۴/۲٪ افزایش می‌یابد که این مقدار در طول ۰/۵ متر نیتروژن اکسید به ترتیب ۷۵٪ و ۶۷٪ افزایش می‌یابد.

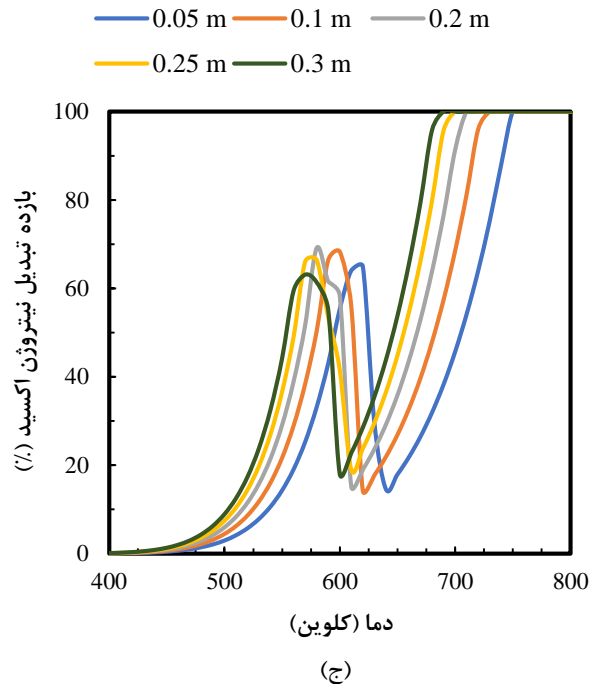
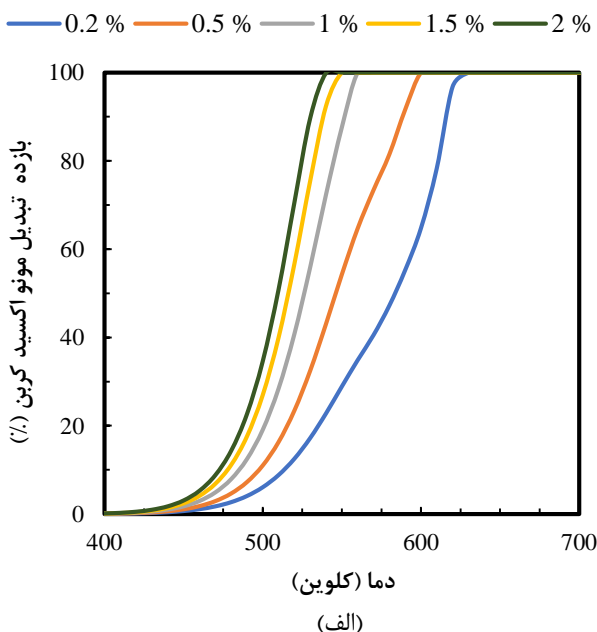
و ۵۵۳/۸ کلوین کاهش می‌یابند. این کاهش دما نشان می‌دهد که با طولانی‌تر شدن مبدل، واکنش‌های شیمیایی در دماهای پایین‌تر به‌طور مؤثرتری انجام می‌شوند.

۳-۲-۳- تأثیرات غلظت اکسیژن

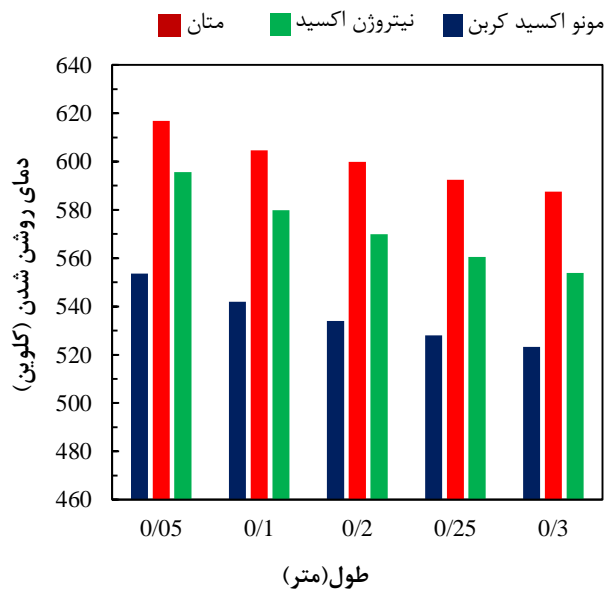
از دیدگاه احتراق، غلظت اکسیژن در گازهای خروجی نقش حیاتی در اکسیداسیون و کاهش آلاینده‌ها دارد. حتی تغییرات جزئی در سطوح اکسیژن می‌تواند به‌طور قابل‌توجهی بر بازده حذف متان، مونواکسیدکربن و نیتروژن اکسید با استفاده از مبدل کاتالیستی تأثیر بگذارد.

در شکل (۷) مشاهده می‌شود که با افزایش غلظت اکسیژن، عملکرد مبدل کاتالیستی بهبود یافته و به تسریع بازده تبدیل کمک می‌کند، به‌طوری‌که اجزای آلاینده در دماهای پایین‌تری کاهش می‌یابند. این به این دلیل است که افزایش اکسیژن باعث تسریع واکنش‌های اکسیداسیون شده و زمان بیشتری برای تکمیل این واکنش‌ها فراهم می‌کند. به‌علاوه، افزایش غلظت اکسیژن باعث افزایش تماس مولکول‌های اکسیژن با سطح کاتالیست شده که این امر به‌طور مستقیم باعث افزایش نرخ واکنش‌ها و بهبود بازده تبدیل می‌شود.

شکل (۷) نشان می‌دهد که با افزایش محتوای اکسیژن، بازده تبدیل نیتروژن اکسید ابتدا افزایش یافته و سپس کاهش می‌یابد. به‌طور خاص، در دمای ۶۲۰ کلوین با افزایش غلظت اکسیژن از ۰/۲٪ به ۲٪، بازده تبدیل نیتروژن اکسید از ۱۰۰٪ به ۷/۱۷٪ کاهش می‌یابد.



شکل ۲ تأثیر دما بر بازده تبدیل در طول‌های متفاوت مبدل کاتالیستی؛ الف- مونواکسیدکربن، ب- متان، ج- نیتروژن اکسید



شکل ۳ دمای فعال‌سازی در طول‌های متفاوت مبدل کاتالیستی

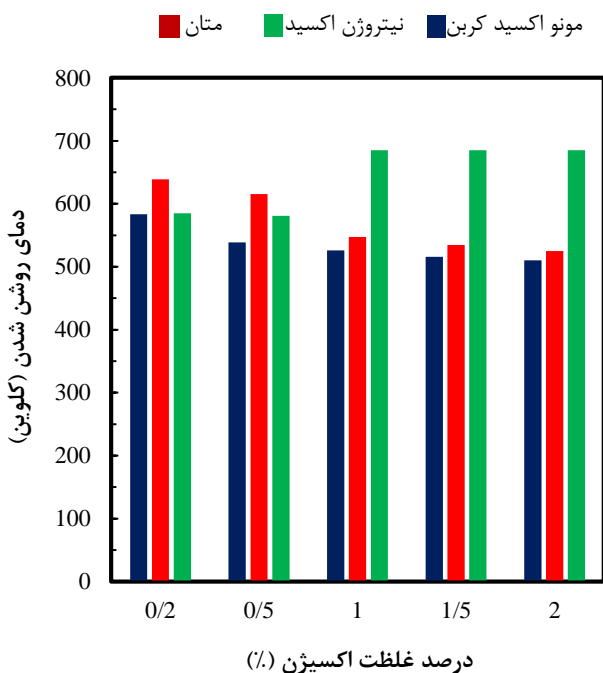
این امر موجب افزایش تماس مولکول‌های آلاینده با سطح کاتالیست و بهبود کارایی واکنش‌های شیمیایی می‌شود. در نتیجه، بازده تبدیل بهبود یافته و به‌طور سریع‌تری افزایش می‌یابد. نتایج نشان می‌دهند که در طول ۵ سانتی‌متر، دمای روشن‌شدن کربن مونواکسید، متان و نیتروژن اکسید به ترتیب برابر با ۵۵۳/۶، ۶۱۶/۸ و ۵۹۵/۷ کلوین است. اما با افزایش طول مبدل به ۳۰ سانتی‌متر، این مقادیر به ترتیب به ۵۲۳/۲، ۵۸۷/۶

شکل (۸) تأثیر غلظت‌های مختلف اکسیژن بر دمای روشن شدن را نشان می‌دهد. با افزایش غلظت اکسیژن در گازهای خروجی، دمای روشن شدن برای متان و مونو اکسیدکربن کاهش می‌یابد. به‌طور خاص، اختلاف دمایی بین غلظت‌های ۰/۲٪ و ۲٪ اکسیژن برای متان برابر با ۱۱۳/۵ کلوین و برای مونو اکسیدکربن برابر با ۷۳/۵ کلوین است.

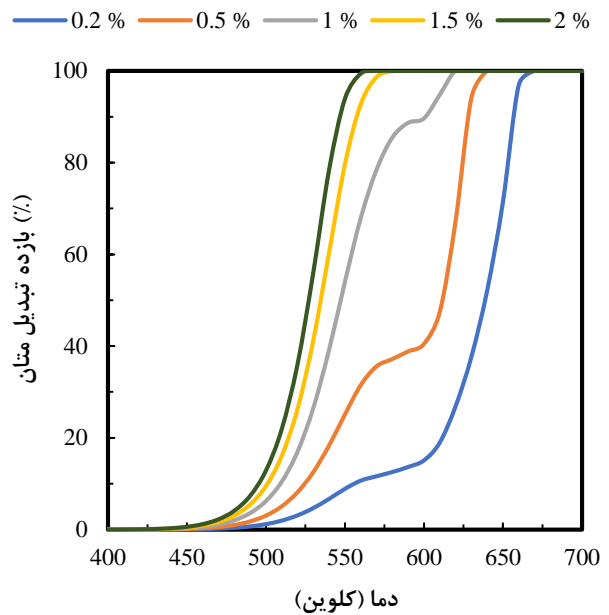
این پدیده به این دلیل رخ می‌دهد که در دماهای ورودی پایین‌تر، اکسیداسیون متان و مونو اکسیدکربن به‌طور عمده توسط اکسیژن انجام می‌شود. در شرایط کم‌اکسیژن، کمبود اکسیژن منجر به محدودیت در واکنش‌های اکسیداسیون می‌شود.

از سوی دیگر، با توجه به شکل (۸)، با افزایش غلظت اکسیژن، دمای روشن شدن برای نیتروژن اکسید افزایش می‌یابد. به‌طوری‌که در غلظت اکسیژن ۰/۲٪ دمای روشن شدن برای مونو اکسیدکربن، متان و نیتروژن اکسید به ترتیب برابر با ۵۸۳/۵، ۶۳۸/۵ و ۵۸۴/۹ کلوین است، در حالی که این مقادیر برای غلظت اکسیژن ۲٪ برابر با ۵۰۹/۱، ۵۲۵ و ۶۸۵ کلوین هستند.

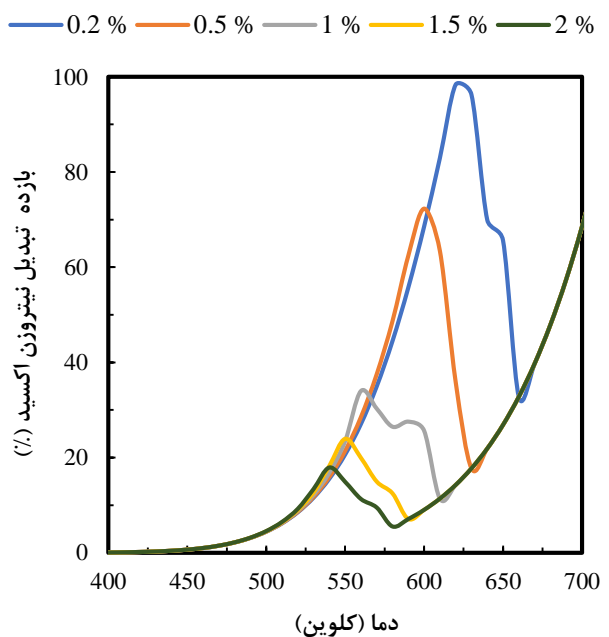
این پدیده به این دلیل رخ می‌دهد که در شرایط غنی از اکسیژن، نیتروژن اکسید به‌عنوان محصول جانبی واکنش‌های اکسیداسیون مونو اکسیدکربن و متان تولید می‌شود. در این شرایط، اکسیداسیون کامل مونو اکسیدکربن و متان باعث افزایش غلظت نیتروژن اکسید و در نتیجه افزایش دمای روشن شدن آن می‌شود.



شکل ۴ دمای فعال‌سازی در درصد غلظت‌های متفاوت اکسیژن



(ب)



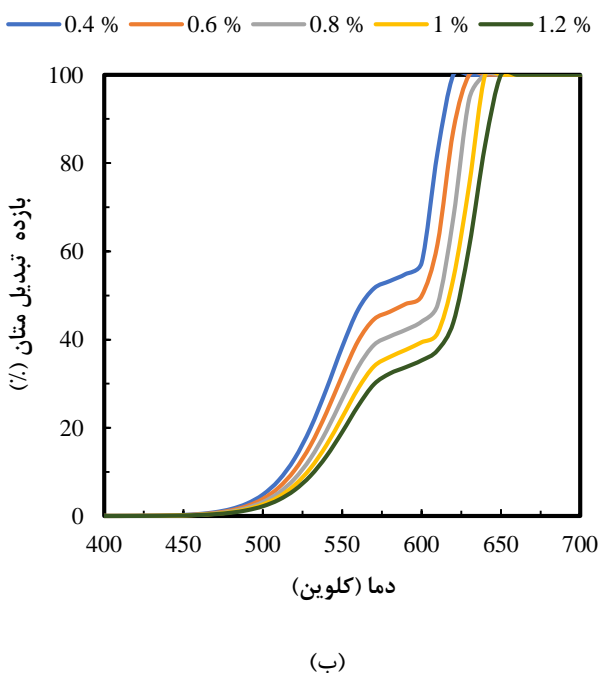
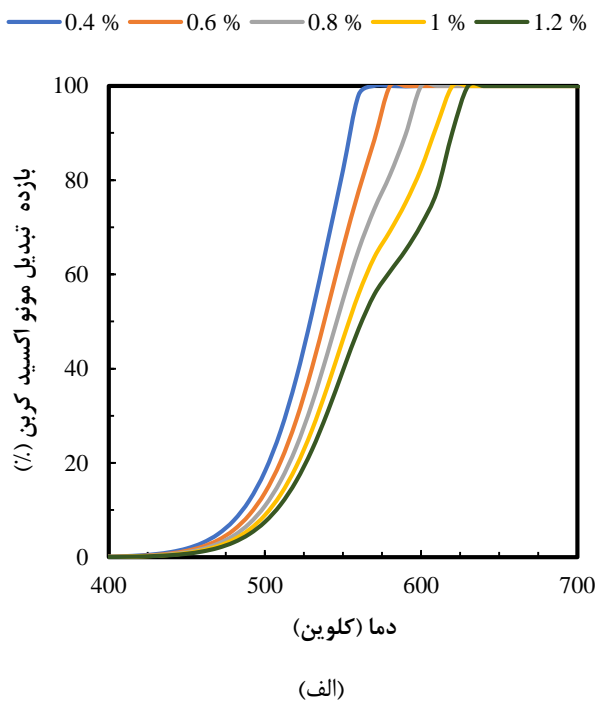
(ج)

شکل ۷ تأثیر دما بر بازده تبدیل در غلظت‌های متفاوت اکسیژن
الف- مونو اکسیدکربن، ب- متان، ج- نیتروژن اکسید

این امر به این دلیل است که در شرایط غنی از اکسیژن، واکنش‌های اکسیداسیون نیتروژن اکسید به نیتروژن دی اکسید افزایش می‌یابد که این امر باعث کاهش بازده تبدیل نیتروژن اکسید می‌شود. همچنین، در دماهای بالاتر از ۷۰۰ کلوین، بازده تبدیل نیتروژن اکسید به ۱۰۰٪ می‌رسد که نشان می‌دهد شرایط کم‌اکسیژن به‌طور مؤثرتری به کاهش نیتروژن اکسید کمک می‌کند.

۳-۲-۴- تأثیرات غلظت اکسیژن

تغییرات غلظت کربن مونو اکسید تأثیرات متفاوتی بر دمای روشن شدن این سه آلاینده دارد که به واکنش‌های شیمیایی و مکانیزم‌های اکسیداسیون و کاهش مرتبط است. با افزایش غلظت مونو اکسید کربن در گازهای خروجی، دمای روشن شدن متان به‌طور تدریجی افزایش می‌یابد. این افزایش به این دلیل رخ می‌دهد که در غلظت‌های بالاتر مونو اکسید کربن، رقابت بیشتری بین مولکول‌های مونو اکسید کربن و متان برای واکنش با اکسیژن موجود در محیط به وجود می‌آید.



شکل (۹) تأثیر غلظت‌های مختلف مونو اکسید کربن در گازهای خروجی را بر بازده تبدیل مبدل کاتالیستی نشان می‌دهد. تغییرات غلظت مونو اکسید کربن تأثیر قابل توجهی بر بازده تبدیل آلاینده‌ها دارد و به‌طور مستقیم با دمای ورودی و شرایط احتراق در ارتباط است. در شکل (۹-الف) تغییرات غلظت کربن بر بازده تبدیل مونو اکسید کربن بررسی شده است. با افزایش مونو اکسید-کربن گازهای خروجی نیاز به دمای ورودی بالاتری برای دستیابی به بازده تبدیل ۱۰۰٪ افزایش می‌یابد. این پدیده به این دلیل رخ می‌دهد که در غلظت‌های بالاتر مونو اکسید کربن، تعداد مولکول‌های مونو اکسید کربن موجود برای واکنش با اکسیژن افزایش یافته و زمان تماس بیشتری با کاتالیست نیاز است. به-عنوان مثال، برای دستیابی به بازده تبدیل ۱۰۰٪ در غلظت ۰/۲٪، دمای ۵۶۰ کلوین کافی است، در حالی که برای غلظت ۱/۲٪، دمای ۶۳۰ کلوین مورد نیاز است. این نتایج نشان می‌دهد که افزایش غلظت مونو اکسید کربن باعث افزایش دمای روشن-شدن، شده و در نتیجه بازده تبدیل به دمای بالاتری نیاز دارد.

در شکل (۹-ب) تغییرات غلظت کربن مونو اکسید بر بازده تبدیل متان بررسی شده است. برخلاف مونو اکسید کربن، با افزایش غلظت مونو اکسید کربن در گازهای خروجی، بازده تبدیل متان به‌طور قابل توجهی افزایش می‌یابد. این امر به این دلیل است که مونو اکسید کربن به‌عنوان یک عامل کاهش‌دهنده در واکنش‌های اکسیداسیون متان عمل می‌کند و باعث افزایش سرعت واکنش‌های اکسیداسیون می‌شود. به‌عنوان مثال، در غلظت‌های ۰/۴ و ۰/۶٪، در دمای ۵۵۰ کلوین، بازده تبدیل به ترتیب برابر با ۳۸/۳٪ و ۳۱/۸٪ است. همچنین، برای دستیابی به بازده تبدیل ۱۰۰٪ در این دو غلظت، دمای مورد نیاز به ترتیب برابر با ۶۲۰ و ۶۳۰ کلوین است.

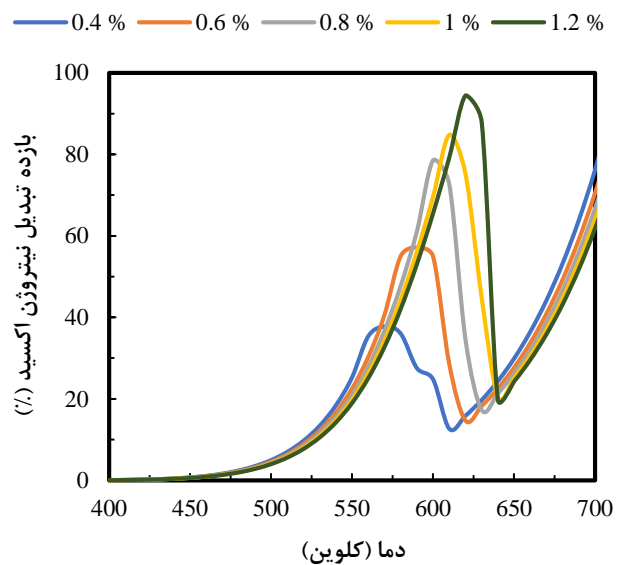
در شکل (۹-ج) تأثیر غلظت مونو اکسید کربن بر بازده تبدیل نیتروژن اکسید بررسی شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، با افزایش غلظت مونو اکسید کربن در گازهای خروجی، بازده تبدیل نیتروژن اکسید به‌طور قابل توجهی بهبود می‌یابد و در شرایط غنی از مونو اکسید کربن به ۱۰۰٪ می‌رسد. به‌عنوان مثال، در غلظت ۰/۴٪، بازده تبدیل نیتروژن اکسید در دمای ۵۷۰ کلوین به ۴۰/۶٪ می‌رسد، در حالی که در غلظت ۱/۲٪، اوج بازده تبدیل در دمای ۶۲۰ کلوین و ۹۴/۴٪ مشاهده می‌شود.

شکل (۱۰) تأثیر غلظت‌های مختلف مونو اکسید کربن در گازهای خروجی را بر دمای روشن شدن آلاینده‌های متان، مونو-اکسید کربن و نیتروژن اکسید در مبدل کاتالیستی نشان می‌دهد.

غلظت مونواکسیدکربن از ۰/۴٪ به ۱/۲٪، دمای روشن شدن نیتروژن اکسید از ۶۷۶/۴ کلوین به ۵۸۶/۶ کلوین کاهش می‌یابد. این کاهش به دلیل واکنش‌های کاهش نیتروژن اکسید با مونو-اکسید کربن بر روی سطح کاتالیست است که در غلظت‌های بالاتر مونواکسیدکربن بهبود می‌یابد.

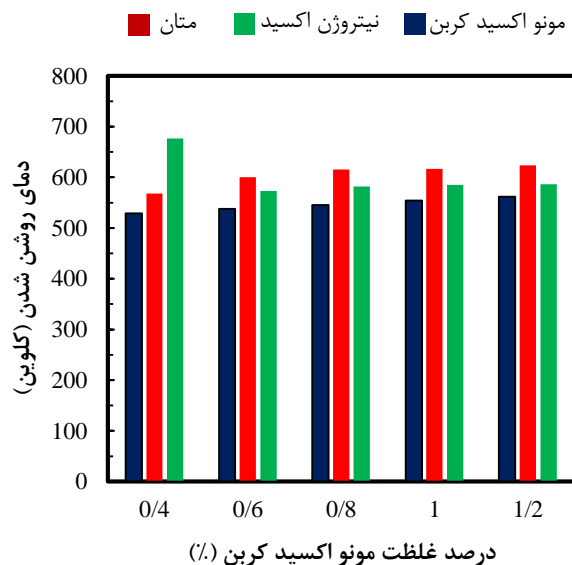
۴- نتیجه‌گیری

این مطالعه یک مدل عددی برای مبدل‌های کاتالیستی توسعه داده است که با ادغام سینتیک واکنش‌های پیشرفته و اثرات انتقال جرم، دقت پیش‌بینی را بهبود می‌بخشد. این مدل در محیط متلب به صورت یک‌بعدی و در حالت پایدار پیاده‌سازی شده است. برخلاف مدل‌های قبلی که به مکانیزم‌های واکنش ساده شده تکیه می‌کردند، این رویکرد از یک چارچوب واکنش چندگونه‌ای بهره می‌برد که رفتار واقعی مبدل کاتالیستی را به طور دقیق‌تر شبیه‌سازی می‌کند. مدل ارائه شده با استفاده از داده‌های تجربی اعتبارسنجی شد و نتایج نشان داد که اختلاف بین بازده تبدیل شبیه‌سازی شده و داده‌های تجربی به ۸/۷۲ درصد برای متان، ۵/۰۰ درصد برای کربن مونو اکسید و ۱۲/۶ درصد برای نیتروژن اکسید کاهش یافته است. این اختلاف کمتر نسبت به مدل‌های قبلی نشان می‌دهد که مدل پیشنهادی با دقت بیشتری می‌تواند عملکرد مبدل کاتالیستی را پیش‌بینی کند. همچنین، نتایج نشان داد که پارامترهای عملیاتی تأثیر قابل توجهی بر عملکرد تبدیل آلاینده‌ها دارند. برای مثال، افزایش دبی حجمی از ۰/۵ به ۱ متر مکعب بر ثانیه در دمای ۵۰۰ کلوین باعث کاهش راندمان تبدیل و افزایش دمای روشن شدن به میزان بیش از ۸۰ کلوین شد. نتایج نشان داد که افزایش طول مبدل کاتالیستی از ۰/۵ به ۰/۳ متر در دمای ۵۵۰ کلوین، راندمان تبدیل مونواکسید کربن و نیتروژن اکسید را بیش از ۴۰ درصد بهبود می‌بخشد. همچنین افزایش غلظت اکسیژن باعث بهبود تبدیل مونواکسید کربن و متان می‌شود، اما کارایی کاهش نیتروژن اکسید را کاهش می‌دهد که بر لزوم بهینه‌سازی نسبت هوا به سوخت در استراتژی‌های کنترل آلاینده‌ها تأکید دارد. بررسی‌ها نشان داد که با افزایش غلظت مونواکسید کربن در گازهای خروجی، دمای روشن شدن متان و مونواکسید کربن افزایش می‌یابد، درحالی‌که دمای روشن شدن نیتروژن اکسید کاهش پیدا می‌کند. این نتایج نشان می‌دهد که کنترل غلظت مونواکسید کربن در گازهای خروجی می‌تواند به طور مؤثری دمای روشن شدن و بازده تبدیل آلاینده‌ها را بهبود بخشد. همچنین، یافته‌ها نشان داد که افزایش طول مبدل کاتالیستی



(ج)

شکل ۵ تأثیر دما بر بازده تبدیل در غلظت‌های متفاوت؛ الف- مونواکسیدکربن، ب- متان، ج- نیتروژن اکسید



شکل ۶ تأثیر غلظت‌های مختلف کربن مونو اکسید بر گازهای خروجی را بر روی دمای روشن شدن

در مورد دمای روشن شدن مونواکسیدکربن نیز با افزایش غلظت مونواکسیدکربن در گازهای خروجی، دمای روشن شدن مونواکسیدکربن به طور قابل توجهی افزایش می‌یابد. این افزایش به دلیل رقابت بین مولکول‌های مونواکسیدکربن برای واکنش با اکسیژن است. با افزایش غلظت مونواکسیدکربن، دمای روشن شدن مونواکسیدکربن به میزان ۳۲/۲۰ کلوین افزایش می‌یابد. در مورد نیتروژن اکسید رفتار متفاوتی مشاهده می‌شود. با افزایش غلظت مونواکسیدکربن، دمای روشن شدن نیتروژن اکسید به طور قابل توجهی کاهش می‌یابد. به عنوان مثال، با تغییر

۶- مراجع

- [1] G. Kavitha *et al.*, "Thermodynamic and Emission Analysis of Waste Plastic Oil Fuelled Diesel Engine with Ce-Al Catalyst-Based Catalytic Converters—An Experimental Study," *Process Safety and Environmental Protection*, p. 106997, 2025 <https://doi.org/10.1016/j.psep.2025.106997>.
- [2] S. Liu *et al.*, "Recent Advances and Perspectives in Catalyst Design for Converting Syngas to Higher Alcohols," *Energy & Fuels*, vol. 38, no. 16, pp. 14769-14796, 2024 <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.4c01419>.
- [3] G. C. Koltsakis and A. M. Stamatelos, "Catalytic automotive exhaust aftertreatment," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 23, no. 1, pp. 1-39, 1997 [https://doi.org/10.1016/S0360-1285\(97\)00003-8](https://doi.org/10.1016/S0360-1285(97)00003-8).
- [4] J. Koop and O. Deutschmann, "Detailed surface reaction mechanism for Pt-catalyzed abatement of automotive exhaust gases," *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 91, no. 1-2, pp. 47-58, 2009 <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2009.05.006>.
- [5] D. Chatterjee, O. Deutschmann, and J. Warnatz, "Detailed surface reaction mechanism in a three-way catalyst," *Faraday Discussions*, vol. 119, pp. 371-384, 2002 <https://doi.org/10.1039/B101968F>.
- [6] J. Gong *et al.*, "O₂ dosage as a descriptor of TWC performance under lean/rich dithering in stoichiometric natural gas engines," *Catalysis Today*, vol. 360, pp. 294-304, 2021 <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2020.02.022>.
- [7] D. Ferri, M. Elsener, and O. Kröcher, "Methane oxidation over a honeycomb Pd-only three-way catalyst under static and periodic operation," *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 220, pp. 67-77, 2018 <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2017.07.070>.
- [8] M. Wang, P. D. Eggenschwiler, D. Ferri, and O. Kröcher, "Experimental and modeling-based analysis of reaction pathways on catalysts for natural gas engines under periodic lean/rich oscillations," *Chemical Engineering Journal*, vol. 430, p. 132848, 2022 <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.132848>.
- [9] D. Bounechada, G. Groppi, P. Forzatti, K. Kallinen, and T. Kinnunen, "Effect of periodic lean/rich switch on methane conversion over a Ce-Zr promoted Pd-Rh/Al₂O₃ catalyst in the exhausts of natural gas vehicles," *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 119, pp. 91-99, 2012 <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2012.02.025>.
- [10] Y. Tan, C. Kou, J. E. C. Feng, and D. Han, "Effect of different exhaust parameters on conversion

منجر به افزایش زمان تماس بین گازهای خروجی و کاتالیست شده و در نتیجه تجزیه آلاینده‌ها به‌طور کامل‌تری صورت می‌گیرد. با این حال، افزایش طول مبدل ممکن است منجر به افزایش هزینه‌های ساخت و افت فشار در سیستم آگزوز شود که می‌تواند بر عملکرد موتور تأثیر بگذارد. افزایش طول مبدل هرچند باعث بهبود بازده تبدیل و کاهش دمای روشن شدن می‌شود، اما با افزایش هزینه ساخت، فضای نصب، و افت فشار همراه است که می‌تواند عملکرد موتور را تحت تأثیر قرار دهد.

۵- فهرست علائم و اختصارات

علائم انگلیسی

A	ضریب فعالیت
C	غلظت جزء (%)
c_p	ظرفیت گرمایی ویژه ($J \cdot K^{-1} \cdot kg^{-1}$)
D	ضریب پخش جرمی
D_H	قطر هیدرولیکی
E_a	انرژی فعال‌سازی ($kJ \cdot mol^{-1}$)
G_A	مساحت تعویض جزء
H	آنتالپی واکنش
h	ضریب انتقال حرارت جابجایی
k_m	ضریب انتقال جرم
Nu	عدد ناسلت
R	ثابت جهانی گاز یا سرعت واکنش
Sh	عدد شروود
T	دما (K)
u	سرعت ($m \cdot s^{-1}$)
X	غلظت (%)

علائم یونانی

ρ	چگالی ($kg \cdot m^{-3}$)
λ	نسبت سوخت به هوا

اندیس‌ها

g	گاز
j	جزء
s	جامد

اختصارات

FDM	روش گسست‌سازی اختلاف محدود
LOT	دمای روشن شدن

۵- تشکر و قدردانی

از تمامی کسانی که ما را در نگارش این مقاله یاری رساندند، کمال تشکر و قدردانی را داریم.

- Technical Paper, 0148-7191, 2000
<https://doi.org/10.4271/2000-01-0211>.
- [20] W. Luc *et al.*, "Two-dimensional copper nanosheets for electrochemical reduction of carbon monoxide to acetate," *Nature Catalysis*, vol. 2, no. 5, pp. 423-430, 2019 <https://doi.org/10.1038/s41929-019-0269-8>.
- [21] D. Di Maio, E. Stramaccioni, D. A. Misul, P. Napolitano, and C. Beatrice, "A Multiphysics Co-Simulation Framework of a Gas Engine and Three-Way Catalyst toward a Complete Vehicle Design Model," *Machines*, vol. 10, no. 852, 2022 <https://doi.org/10.3390/machines10100852>.
- [22] M. Doble, "Perry's chemical engineers' handbook," *McGraw-Hill, New York, US*, 2007 <https://doi.org/10.3390/machines10100852>.
- [23] G. C. Koltsakis, P. A. Konstantinidis, and A. M. Stamatelos, "Development and application range of mathematical models for 3-way catalytic converters," *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 12, no. 2-3, pp. 161-191, 1997 [https://doi.org/10.1016/S0926-3373\(96\)00073-2](https://doi.org/10.1016/S0926-3373(96)00073-2).
- [24] S. H. Oh and J. C. Cavendish, "Transients of monolithic catalytic converters. Response to step changes in feedstream temperature as related to controlling automobile emissions," *Industrial & Engineering Chemistry Product Research and Development*, vol. 21, no. 1, pp. 29-37, 1982 <https://doi.org/10.1021/i300005a006>.
- [25] Y. Qian *et al.*, "Investigation of the formation characteristics of N₂O and NH₃ for stoichiometric natural gas engines with Pd-only catalyst," *Fuel*, vol. 329, p. 125223, 2022 <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.125223>.
- [26] S. Turns, "An Introduction to Combustion: Concept and Application," ed: McGraw-Hill, 2000 <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.125223>.
- [27] F. Huang *et al.*, "Pd or PdO: Catalytic active site of methane oxidation operated close to stoichiometric air-to-fuel for natural gas vehicles," *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 219, pp. 73-81, 2017 <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2017.07.037>.
- [28] D. Lou, Y. Ren, X. Li, Y. Zhang, and X. Sun, "Effect of operating conditions and TWC parameters on emissions characteristics of a stoichiometric natural gas engine," *Energies*, vol. 13, no. 18, p. 4905, 2020 <https://doi.org/10.3390/en13184905>.
- [29] E. Jiaqiang, J. Luo, D. Han, Y. Tan, C. Feng, and Y. Deng, "Effects of different catalysts on light-off temperature of volatile organic components in the rotary diesel particulate filter during the regeneration," *Fuel*, vol. 310, p. 122451, 2022 <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.122451>.
- efficiency enhancement of a Pd-Rh three-way catalytic converter for heavy-duty natural gas engines," *Energy*, vol. 292, p. 130483, 2024/04/01/2024, <https://doi.org/10.1016/j.energy.2024.130483>.
- [11] Y. Tan, E. Jiaqiang, C. Kou, C. Feng, and D. Han, "Effects of critical structure parameters on conversion performance enhancement of a Pd-Rh dual-carrier catalytic converter for heavy-duty natural gas engines," *Energy*, p. 131934, 2024 <https://doi.org/10.1016/j.energy.2024.131934>.
- [12] Q. Zhang, M. Li, G. Li, S. Shao, and P. Li, "Transient emission characteristics of a heavy-duty natural gas engine at stoichiometric operation with EGR and TWC," *Energy*, vol. 132, pp. 225-237, 2017 <https://doi.org/10.1016/j.energy.2017.05.039>.
- [13] R. Hutter, L. De Libero, P. Elbert, and C. H. Onder, "Catalytic methane oxidation in the exhaust gas aftertreatment of a lean-burn natural gas engine," *Chemical Engineering Journal*, vol. 349, pp. 156-167, 2018 <https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.05.054>.
- [14] P. Auvinen *et al.*, "A detailed study on regeneration of SO₂ poisoned exhaust gas after-treatment catalysts: In pursuance of high durability and low methane, NH₃ and N₂O emissions of heavy-duty vehicles," *Fuel*, vol. 291, p. 120223, 2021 <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.120223>.
- [15] Q. Zhang, M. Li, S. Shao, and G. Li, "Ammonia emissions of a natural gas engine at the stoichiometric operation with TWC," *Applied Thermal Engineering*, vol. 130, pp. 1363-1372, 2018 <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2017.11.098>.
- [16] S. Yoon *et al.*, "Chemical and toxicological properties of emissions from CNG transit buses equipped with three-way catalysts compared to lean-burn engines and oxidation catalyst technologies," *Atmospheric Environment*, vol. 83, pp. 220-228, 2014 <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2013.11.003>.
- [17] Q. Zhang, Z. Li, Z. Wei, M. Li, and X. Zheng, "Experiment investigation on the emission characteristics of a stoichiometric natural gas engine operating with different reference fuels," *Fuel*, vol. 269, p. 117449, 2020 <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117449>.
- [18] Z. Zhang *et al.*, "Multi-objective optimization of the three-way catalytic converter on the combustion and emission characteristics for a gasoline engine," *Energy*, vol. 277, p. 127634, 2023 <https://doi.org/10.1016/j.energy.2023.127634>.
- [19] J. Braun *et al.*, "Influence of physical and chemical parameters on the conversion rate of a catalytic converter: a numerical simulation study," SAE

- engine," *J. Jilin Univ*, vol. 1, pp. 79-87, 2019
<https://doi.org/10.1016/j.cej.2013.12.039> .
- [32] Y. Cui, M. Shen, J. Wang, J. Wang, G. Shen, C. Wang, "Comprehensive kinetic model of a three-way catalyst for stoichiometric natural gas engines: Experiments and simulation," *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, vol. 136, p. 104416, 2022
<https://doi.org/10.1016/j.tjice.2022.104416>.
- [30] S. B. Kang, S. J. Han, I.-S. Nam, B. K. Cho, C. H. Kim, and S. H. Oh, "Detailed reaction kinetics for double-layered Pd/Rh bimetallic TWC monolith catalyst," *Chemical Engineering Journal*, vol. 241, pp. 273-287, 2014
<https://doi.org/10.1016/j.cej.2013.12.039>.
- [31] Z. Li *et al.*, "Effect of A/F ratio fluctuation on light-off performance of methane of TWC for CNG