



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΔΥΤΙΚΗΣ ΑΤΤΙΚΗΣ**

Τμήμα Μηχανικών Βιομηχανικής
Σχεδίασης και Παραγωγής

&

**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΑΙΓΑΙΟΥ**

Τμήμα Ναυτιλίας και
Επιχειρηματικών Υπηρεσιών



**ΔΙΔΡΥΜΑΤΙΚΟ
ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
«ΝΕΕΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ ΣΤΗ ΝΑΥΤΙΛΙΑ ΚΑΙ ΤΙΣ ΜΕΤΑΦΟΡΕΣ»**

Διερεύνηση της συμπεριφοράς καταλυτικών μετατροπών ως συνάρτηση της δομής και της πυκνότητας κυψελών



Επιβλέπων Καθηγητής: Β. Τσουκαλάς

Όνοματεπώνυμο Σπουδαστή:

ΜΑΤΘΑΙΟΣ ΑΛΠΑΣ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΟΥΧΟΣ ΠΟΛΙΤΙΚΟΣ ΜΗΧΑΝΙΚΟΣ ΕΜΠ & ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΟΣ ΜΗΧΑΝΙΚΟΣ

Φεβρουάριος, 2021

Μέλη Εξεταστικής Επιτροπής

Τσουκαλάς Βασίλειος

Παπουτσιδάκης Μιχαήλ

Νικητάκος Νικήτας

ΔΗΛΩΣΗ ΣΥΓΓΡΑΦΕΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ

Ο κάτωθι υπογεγραμμένος **Αλπός Ματθαίος του Κωνσταντίνου**, με αριθμό μητρώου **8056123** φοιτητής του Διϊδρυματικού Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών «Νέες Τεχνολογίες στη Ναυτιλία και τις Μεταφορές» του Τμήματος Μηχανικών Βιομηχανικής Σχεδίασης και Παραγωγής της Σχολής Μηχανικών Πανεπιστημίου Δυτικής Αττικής, δηλώνω υπεύθυνα ότι: «Είμαι συγγραφέας αυτής της μεταπτυχιακής εργασίας και ότι κάθε βοήθεια την οποία είχα για την προετοιμασία της είναι πλήρως αναγνωρισμένη και αναφέρεται στην εργασία. Επίσης, οι όποιες πηγές από τις οποίες έκανα χρήση δεδομένων, ιδεών ή λέξεων, είτε ακριβώς είτε παραφρασμένες, αναφέρονται στο σύνολό τους, με πλήρη αναφορά στους συγγραφείς, τον εκδοτικό οίκο ή το περιοδικό, συμπεριλαμβανομένων και των πηγών που ενδεχομένως χρησιμοποιήθηκαν από το διαδίκτυο. Επίσης, βεβαιώνω ότι αυτή η εργασία έχει συγγραφεί από μένα αποκλειστικά και αποτελεί προϊόν πνευματικής ιδιοκτησίας τόσο δικής μου, όσο και του Ιδρύματος. Παράβαση της ανωτέρω ακαδημαϊκής μου ευθύνης αποτελεί ουσιώδη λόγο για την ανάκληση του διπλώματός μου».

Ο Δηλών

Αλπός Ματθαίος

Διερεύνηση της συμπεριφοράς καταλυτικών μετατροπέων ως συνάρτηση της δομής και της πυκνότητας κυψελών

Ματθαίος Αλπας
Επιβλέπων: Β. Τσουκαλάς

Σύνοψη

Ο καταλυτικός μετατροπέας είναι η συσκευή ελέγχου εκπομπών ρύπων που μετατρέπει τοξικά αέρια σε λιγότερο τοξικά. Η παρούσα εργασία έχει σκοπό τη διερεύνηση η διερεύνηση του φαινομένου της υποπίεσης και της συμπεριφοράς του καταλύτη συναρτήσει της πυκνότητας των κυψελών του (CPSI) και του πάχους των κυψελών. Τα βασικά συμπεράσματα είναι ότι το φαινόμενο της αντίθλιψης είναι κλιμακωτά εντονότερο στους πυκνότερους καταλύτες. Από τις αναλύσεις στο Chemkin προκύπτει ότι όσο αυξάνεται η πυκνότητα των κυψελών και το πάχος των τοιχωμάτων μειώνονται οι άκαυστοι υδρογονάνθρακες και τα βλαβερά καυσαέρια. Παρατηρείται όμως ότι μπορεί να αντικατασταθεί ένας πυκνός καταλυτικός μετατροπέας με έναν καταλυτικό μετατροπέα λιγότερο πυκνό με μεγαλύτερα πάχη τοιχωμάτων. Με τον τρόπο αυτό είναι ταυτόχρονα δυνατή όχι μόνο η εξοικονόμηση στην παραγωγή του καταλύτη λόγω μικρότερης ποσότητας ευγενών μετάλλων αλλά και η αρνητική επίδραση του φαινομένου της αντίθλιψης.

Investigation of the behavior of catalytic converters as a function of structure and cell density

Matthew Alpas
Supervisor: B. Tsoukalas

Abstract

The catalytic converter is the pollutant emission control device that converts toxic gases into less toxic ones. This thesis aims to investigate the phenomenon of backpressure and the behaviour of the catalyst as a function of its cell density (CPSI) and cell wall thickness. The key conclusions are that the backpressure effect is gradually more intense the denser the catalytic converter is. Chemkin analyses show that as cell density and wall thickness increase, unburned hydrocarbons and harmful exhaust gases decrease. However, a dense catalytic converter can be replaced with a less dense catalytic converter but with greater wall thicknesses to achieve same results. In this way, it is possible to not only

save on catalyst production costs due to the cutoff of precious metals but also the negative effects of the backpressure phenomenon.

Περιεχόμενα

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1	1
1. Εισαγωγή.....	1
1.1 Εισαγωγή στην Έννοια του Καταλύτη.....	1
1.2 Η Ιστορία του Καταλύτη.....	2
1.3 Συστατικά Μέρη του Καταλύτη.....	3
1.4 Τύποι Καταλυτών	6
1.5 Χρήση Καταλυτών	11
1.6 Απενεργοποίηση των καταλυτικών μετατροπών.....	13
1.7 Αδυναμίες της τεχνολογίας των TWCs	14
1.8 Περιβαλλοντική Κατάλυση και Σύγχρονες Ερευνητικές Τάσεις	16
1.9 Ο Σκοπός της Εργασίας	21
1.10 Η Δομή της Εργασίας	21
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2	23
2. Βιβλιογραφική Επισκόπηση	23
2.1 Εργασίες για τη μελέτη της ροής σε ένα καταλυτικό μετατροπέα ...	23
2.2 Εργασίες για τη μοντελοποίηση με CFD	23
2.3 Εργασίες για τη μοντελοποίηση με Ansys Chemkin.....	25
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3	27
3. Μεθοδολογική Προσέγγιση	27
3.1 Περιγραφή λογισμικού CAD	27
3.2 Περιγραφή πεπερασμένων στοιχείων (FEM/FEA)	29
3.3 Περιγραφή προγράμματος Solidworks (CAD).....	30
3.4 Περιγραφή προγράμματος ANSYS (FEA)	32
3.5 Εξοικείωση με το περιβάλλον SolidWorks - Σχεδίαση υποσυστήματος καταλύτη	33

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4	43
4. Προσομοιώσεις με τη Βοήθεια του Ansys.....	43
4.1 Εισαγωγή στο ANSYS WORKBENCH 2020R2	43
4.2 Αποτελέσματα Αναλύσεων στο ANSYS WORKBENCH 2020R2...	60
4.3 Εισαγωγή στο CHEMKIN	81
4.4 Αποτελέσματα Αναλύσεων στο CHEMKIN	84
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5	103
5. Συμπεράσματα και Εισηγήσεις.....	103
5.1 Συμπεράσματα Εργασίας	103
5.4 Εισηγήσεις για Περαιτέρω Έρευνα	104
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	105
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ.....	106

Ολοκληρώνοντας τη μεταπτυχιακή διπλωματική εργασία θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους όσους συνέβαλαν σε αυτή την προσπάθεια.

Ιδιαίτερα θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή μου και επιβλέποντα της εργασίας κ. Β. Τσουκαλά για τη συνεργασία μας όλο αυτό το διάστημα, την εμπιστοσύνη που μου έδειξε, τη σωστή καθοδήγηση και τα κίνητρα που μου έδωσε.

Ένα θερμό ευχαριστώ οφείλω σε όλα τα μέλη του Πανεπιστημίου για την πολύτιμη βοήθειά τους, την υπομονή που έδειξαν και το ευχάριστο κλίμα συνεργασίας.

Τέλος, ένα μεγάλο ευχαριστώ στους δικούς μου ανθρώπους που βρίσκονται πάντα δίπλα μου, με στηρίζουν και με οδηγούν μπροστά.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

1. Εισαγωγή

1.1 Εισαγωγή στην Έννοια του Καταλύτη

Ο καταλυτικός μετατροπέας ή απλά καταλύτης (catalytic converter) είναι συσκευή ελέγχου εκπομπών ρύπων που μετατρέπει τοξικά αέρια και ρύπους στα καυσαέρια σε λιγότερο τοξικά με τη κατάλυση μιας οξειδοαναγωγικής χημικής αντίδρασης. Οι καταλυτικοί μετατροπείς χρησιμοποιούνται σε μηχανές εσωτερικής καύσης που τροφοδοτούνται είτε από καύσιμο ντίζελ είτε από βενζίνη και υγραέριο— συμπεριλαμβάνοντας τις μηχανές πτωχής καύσης (lean-burn engines) καθώς και θερμαντήρες κηροζίνης και θερμάστρες.

Η πρώτη μαζική εισαγωγή και χρήση καταλυτικών μετατροπέων έγινε στις ΗΠΑ. Για να μπορούν τα αυτοκίνητα να συμμορφωθούν στους πιο αυστηρούς κανονισμούς της Υπηρεσίας Περιβαλλοντικής Προστασίας των ΗΠΑ, η εκπομπή καυσαερίων των περισσότερων οχημάτων που τροφοδοτούνται με βενζίνη, υποχρεώθηκαν από το 1975 ως πρώτο έτος παραγωγής να είναι εφοδιασμένα με καταλυτικούς μετατροπείς. Γνωστοί και ως "διοδικοί" μετατροπείς, οι καταλύτες αυτοί συνδύαζαν οξυγόνο με μονοξείδιο του άνθρακα (CO) και άκαυστους υδρογονάνθρακες (HC) για να παραγάγουν νερό (H₂O) και διοξείδιο του άνθρακα (CO₂). Το 1981, οι διοδικοί αυτοί καταλυτικοί μετατροπείς καταργήθηκαν και αντικαταστάθηκαν από τους "τριοδικούς" μετατροπείς που μπορούν και μειώνουν επίσης και τα οξείδια του αζώτου (NO_x) όμως, οι διοδικοί μετατροπείς χρησιμοποιούνται ακόμα για μηχανές πτωχής καύσης, κυρίως επειδή οι τριοδικοί μετατροπείς απαιτούν, είτε πλούσια, είτε στοιχειομετρική καύση για να μειώσουν επιτυχώς τα NO_x, εν αντιθέσει του πτωχού μείγματος των προαναφερθέντων ΜΕΚ.

Αν και οι καταλυτικοί μετατροπείς εφαρμόζονται συνήθως σε συστήματα εξαγωγής (exhaust systems) οχημάτων, χρησιμοποιούνται επίσης σε περονοφόρους ανυψωτές, ηλεκτρικές γεννήτριες, εξοπλισμό ορυχείων, λεωφορεία, φορτηγά, μηχανές τρένου (locomotives) και μοτοσικλέτες. Χρησιμοποιούνται επίσης, σε ορισμένες ξύλινες θερμάστρες για τον έλεγχο των εκπομπών. Αυτό συμβαίνει συνήθως ως απόκριση σε

εκάστοτε κυβερνητικούς κανονισμούς, είτε λόγω άμεσων περιβαλλοντικών κανονισμών ή κανονισμών υγείας και ασφάλειας.

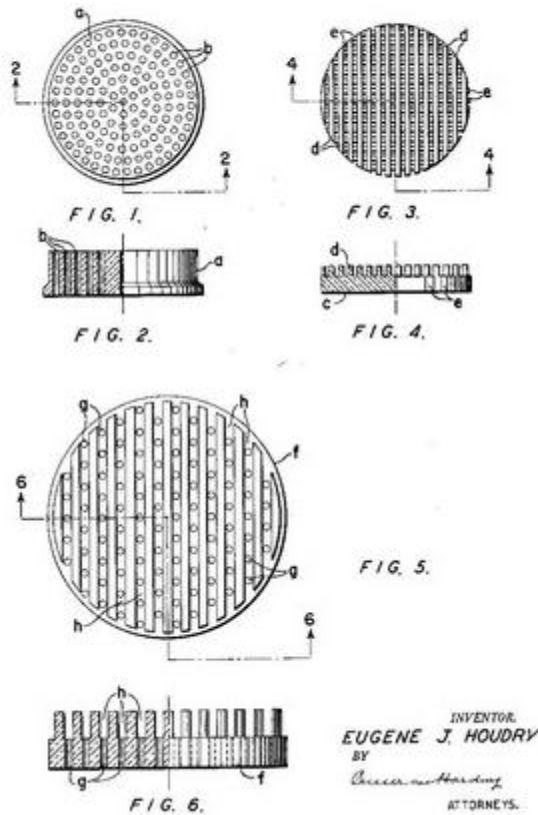
1.2 Η Ιστορία του Καταλύτη

Ο καταλυτικός μετατροπέας επινοήθηκε από τον Γάλλο μηχανικό και ειδικό στην καταλυτική αναμόρφωση του πετρελαίου, Eugene Houdry, που μετακόμισε στις ΗΠΑ το 1930. Όταν δημοσιεύτηκαν τα πρώτα αποτελέσματα των ερευνών της αιθαλομίχλης στο Λος Άντζελες, ο Eugene Houdry προβληματίστηκε για τον ρόλο των καυσαερίων των αυτοκινήτων και των καπνοδόχων στη μόλυνση του αέρα και ίδρυσε μια εταιρία την Oxy-Catalyst. Ο Houdry επικεντρώθηκε στο να αναπτύξει πρώτα καταλυτικούς μετατροπείς για τις καπνοδόχους και αργότερα καταλυτικούς μετατροπείς για τα περονοφόρα ανυψωτικά αποθηκών που χρησιμοποιούσαν χαμηλής ποιότητας αμόλυβδη βενζίνη. Στα μέσα της δεκαετίας του 1950, ξεκίνησε η έρευνα για την ανάπτυξη καταλυτικών μετατροπέων για μηχανές βενζίνης που χρησιμοποιούνται μέχρι και σήμερα στα αυτοκίνητα. Του αποδόθηκε η ευρεσιτεχνία 2,742,437 για την εργασία του, από τις ΗΠΑ.

Ευρεία τοποθέτηση των καταλυτικών μετατροπέων συνέβη έπειτα της καθιέρωσης πιο αυστηρών κανονισμών ελέγχου των εκπομπών ρύπου που οδήγησε στην αφαίρεση του αντικροτικού μέσου (anti-knock agent) τετραιθυλιούχου μολύβδου από τους περισσότερους τύπους βενζίνης. Ο μολύβδος μπορεί να θεωρηθεί ένα «δηλητήριο καταλύτη» και στην πραγματικότητα απενεργοποιεί τον καταλυτικό μετατροπέα σχηματίζοντας μια επίστρωση στην επιφάνεια του καταλύτη.

Οι καταλυτικοί μετατροπείς αναπτύχθηκαν περαιτέρω από μια σειρά από μηχανικούς όπως οι Carl D. Keith, John J. Mooney, Antonio Eleazar από την Engelhard Corporation, δημιουργώντας τον πρώτο καταλυτικό μετατροπέα το 1973.

Ο William C. Pfefferle ανέπτυξε έναν καταλυτικό καυστήρα για αεριοστροβίλους στην αρχή της δεκαετίας του '70, επιτρέποντας καύση χωρίς σημαντικό σχηματισμό μονοξειδίου του άνθρακα και οξειδίων του αζώτου.



Εικόνα 1: Η ευρεσιτεχνία 2,742,437 του καταλύτη

1.3 Συστατικά Μέρη του Καταλύτη

Τα συστατικά μέρη του καταλυτικού μετατροπέα είναι τα εξής ("Καταλυτικός μετατροπέας", 2021)¹:

Η βάση καταλύτη (catalyst support) ή υπόστρωμα

Για καταλυτικούς μετατροπείς MEK, συνήθως ο πυρήνας έχει κυψελοειδή δομή και είναι κεραμικός μονόλιθος. Τα μεταλλικά φύλλα μονόλιθου κατασκευάζονται συνήθως από κράμα Kanthal (FeCrAl) και εφαρμόζονται σε κατασκευές όπου απαιτείται ιδιαίτερα υψηλή θερμική αντίσταση. Και τα δυο υλικά είναι σχεδιασμένα ώστε να παρέχουν μεγάλο εμβαδόν επιφάνειας. Το κεραμικό υπόστρωμα κορδιερίτη (cordierite) που χρησιμοποιείται στη πλειοψηφία των καταλυτικών μετατροπέων εφευρέθηκε από τους

Irwin Lachman, Rodney Bagley, και Ronald Lewis στο Corning Glass, για το οποίο έγιναν δεκτοί στο National Inventors Hall of Fame το 2002.



Εικόνα 2: Εσωτερικό τμήμα μετατροπέα μεταλλικού πυρήνα

Το ενδιάμεσο στρώμα (washcoat)

Το ενδιάμεσο στρώμα είναι φορέας των καταλυτικών υποπροϊόντων και χρησιμοποιείται για να κατανείμει τα υλικά σε ένα μεγάλο εμβαδόν επιφάνειας. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί οξείδιο του αργιλίου, διοξείδιο του πυριτίου, διοξείδιο του τιτανίου, ή μείγμα από διοξείδιο του αργιλίου και οξείδιο του πυριτίου. Τα καταλυτικά υλικά τοποθετούνται στο ενδιάμεσο στρώμα πριν εφαρμοστούν στον πυρήνα. Τα υλικά αυτού του ενδιάμεσου στρώματος, επιλέγονται ώστε να σχηματίσουν μια τραχιά, ακανόνιστη επιφάνεια, που αυξάνει μικροσκοπικά το εμβαδόν της επιφάνειας συγκρινόμενη με την ομαλή επιφάνεια του γυμνού υποστρώματος. Αυτό με τη σειρά του μεγιστοποιεί την ενεργή καταλυτική επιφάνεια που διατίθεται για να αντιδράσει με τα εξαγόμενα υποπροϊόντα της MEK. Το στρώμα θα πρέπει να διατηρήσει το εμβαδόν της επιφανείας του και να αποτρέψει την επίτηξη (sintering) των καταλυτικών μεταλλικών σωματιδίων ακόμα και σε υψηλές θερμοκρασίες (1000 °C).

Οξείδιο του δημητρίου (IV) (σερία ή Ceria) ή (σερία - ζirkονία (οξείδιο του ζirkονίου))

Αυτά τα οξείδια προστίθενται κυρίως ως υποστηρικτές της αποθήκευσης οξυγόνου.

Ο ίδιος ο καταλύτης αποτελείται συνήθως από μείγμα πολύτιμων μετάλλων. Ο λευκόχρυσος είναι ο πιο ενεργός και συνήθης καταλύτης και χρησιμοποιείται ευρέως, αλλά δεν είναι κατάλληλος για όλες τις εφαρμογές λόγω ανεπιθύμητων πρόσθετων αντιδράσεων και υψηλού κόστους. Το παλλάδιο και το ρόδιο είναι δύο επιπλέον πολύτιμα μέταλλα που χρησιμοποιούνται σε καταλυτικούς μετατροπείς, συνήθως συνδυαστικά. Το ρόδιο χρησιμοποιείται ως καταλύτης αναγωγής, το παλλάδιο χρησιμοποιείται ως καταλύτης οξειδωσης και ο λευκόχρυσος χρησιμοποιείται και για αναγωγή και για

οξείδωση. Χρησιμοποιούνται επίσης τα: σίδηρος, δημήτριο, νικέλιο και μαγγάνιο, αν και καθένα έχει τους περιορισμούς του. Το νικέλιο δεν είναι νόμιμο στην Ευρωπαϊκή Ένωση επειδή αντιδρά με το μονοξείδιο του άνθρακα παράγοντας τοξικό τετρακαρβονυλονικέλιο (nickel tetracarbonyl). Ο χαλκός μπορεί να χρησιμοποιηθεί παντού πλην της Ιαπωνίας.

Σε περίπτωση αστοχίας, ο καταλυτικός μετατροπέας μπορεί να ανακυκλωθεί σε σκραπ. Τα πολύτιμα μέταλλα του καταλυτικού μετατροπέα, όπως ο λευκόχρυσος το ρόδιο και το παλλάδιο εξάγονται.



Εικόνα 3: Μετατροπέας κεραμικού πυρήνα

Τοποθέτηση καταλυτικών μετατροπέων

Οι καταλυτικοί μετατροπείς απαιτούν θερμοκρασία τουλάχιστον 800 βαθμών Φαρενάιτ, δηλαδή 426 βαθμών Κελσίου, για να μετατρέψουν αποτελεσματικά τα επιβλαβή καυσαέρια σε αδρανή, όπως το διοξείδιο του άνθρακα και οι υδρατμοί. Γι' αυτό, αρχικά οι καταλυτικοί μετατροπείς τοποθετούνταν κοντά στη μηχανή για να εξασφαλίσουν γρήγορη και πιο άμεση θέρμανση. Όμως, τέτοια τοποθέτηση προκάλεσε πολλά προβλήματα, όπως το κλείδωμα των ατμών (vapor lock).

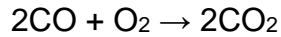
Εναλλακτικά, οι καταλυτικοί μετατροπείς μετακινήθηκαν στο ένα τρίτο της απόστασης πίσω από τη μηχανή και στη συνέχεια τοποθετήθηκαν κάτω από το όχημα.

Τη δεκαετία του 1990 αναπτύχθηκαν ενσωματωμένοι καταλυτικοί μετατροπείς, δηλαδή ήταν ενσωματωμένοι στο σύστημα πολλαπλή εξαγωγής. Η υψηλή τους αποτελεσματικότητα, η ικανότητα εξοικονόμησης χώρου και η ασφάλεια και τους κατέστησαν σύντομα δημοφιλείς. Σήμερα, πολλά από τα νέα οχήματα που πωλούνται, είναι εφοδιασμένα με ενσωματωμένο καταλυτικό μετατροπέα.

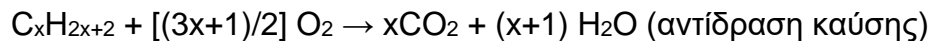
1.4 Τύποι Καταλυτών

Διοδικός: Ο διοδικός (ή «οξειδωσης», που μερικές φορές ονομάζονται και "oxi-cat") καταλυτικός μετατροπέας έχει δύο ταυτόχρονες λειτουργίες:

Οξειδωση του μονοξειδίου του άνθρακα σε διοξείδιο του άνθρακα:



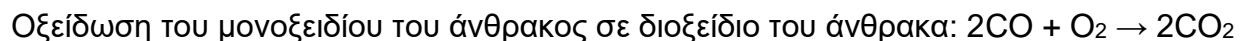
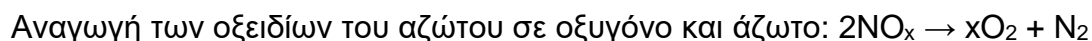
Οξειδωση των άκαυστων υδρογονανθράκων (μερικώς καμένο ή άκαυστο καύσιμο) σε νερό και διοξείδιο του άνθρακα.



Αυτός ο τύπος καταλυτικού μετατροπέα χρησιμοποιείται ευρέως σε ντιζελοκινητήρες για τη μείωση των εκπομπών υδρογονανθράκων και μονοξειδίου του άνθρακα. Χρησιμοποιήθηκαν επίσης σε κινητήρες βενζίνης σε αυτοκίνητα στις ΗΠΑ και τον Καναδά μέχρι το 1981. Λόγω της αναποτελεσματικότητάς τους να ελέγξουν τα οξείδια του αζώτου (NO_x), καταργήθηκαν από τριοδικούς μετατροπείς.

Τριοδικός: Οι τριοδικοί καταλυτικοί μετατροπείς (TWC) έχουν το πρόσθετο πλεονέκτημα ελέγχου της εκπομπής του διοξειδίου του αζώτου και του μονοξειδίου του αζώτου (που μαζί γράφονται ως NO_x και δεν πρέπει να συγχέονται με το υποξείδιο του αζώτου) και είναι πρόδρομες ενώσεις για την αιθαλομίχλη και την όξινη βροχή.

Από το 1981 και έπειτα, οι «τριοδικοί» (οξειδωση-αναγωγή) καταλυτικοί μετατροπείς χρησιμοποιούνται σε συστήματα ελέγχου εκπομπών οχημάτων στις ΗΠΑ και τον Καναδά πολλές άλλες χώρες υιοθέτησαν επίσης αυστηρότερους κανονισμούς εκπομπών οχημάτων που στην πραγματικότητα απαιτούν τριοδικούς μετατροπείς και σε βενζινοκίνητα οχήματα. Οι καταλύτες αναγωγής και οξειδωσης περιέχονται συνήθως σε κοινό περίβλημα· όμως, σε κάποιες περιπτώσεις, μπορεί να έχουν και ξεχωριστά περιβλήματα. Σε ένα τριοδικό καταλυτικό μετατροπέα συντελούνται ταυτόχρονα τρεις αντιδράσεις:



Οξειδωση των άκαυστων υδρογονανθράκων (HC) σε νερό και διοξείδιο του άνθρακα:
 $C_xH_{2x+2} + [(3x+1)/2]O_2 \rightarrow xCO_2 + (x+1)H_2O.$

Αυτές οι τρεις αντιδράσεις συμβαίνουν πιο αποτελεσματικά όταν ο καταλυτικός μετατροπέας δέχεται τα εξερχόμενα προϊόντα από μια μηχανή που κινείται ελαφρώς πάνω από τη στοιχειομετρική αναλογία. Για την καύση της βενζίνης, η αναλογία μερών αέρα ανά μερών καυσίμου είναι μεταξύ 14,6 και 14,8 κατά βάρος. Ο λόγος για καύσιμα υγραερίου (ή υγροποιημένο αέριο πετρελαίου (Autogas ή liquefied petroleum gas ή LPG)), αιθανόλης αλλά και φυσικού αερίου είναι ελαφρώς διαφορετικός για το καθένα και απαιτούνται τροποποιημένες ρυθμίσεις του συστήματος καυσίμου κατά τη χρήση αυτών των εναλλακτικών καυσίμων. Γενικά, οι ΜΕΚ με προσαρμοσμένους τριοδικούς καταλυτικούς μετατροπείς εφοδιάζονται με υπολογιστική ανατροφοδότηση κλειστού κυκλώματος του συστήματος έγχυσης καυσίμου με τη χρήση ενός ή περισσοτέρων αισθητήρων οξυγόνου. Στα πρώτα βήματα της ανάπτυξης των τριοδικών μετατροπέων, χρησιμοποιήθηκαν επίσης και εξαερωτήρες εφοδιασμένοι με έλεγχο μείγματος ανατροφοδότησης.

Οι τριοδικοί μετατροπείς είναι αποτελεσματικοί όταν η μηχανή λειτουργεί σε στενό εύρος αναλογιών αέρα-καυσίμου κοντά στο στοιχειομετρικό σημείο, όπου η σύσταση των καυσαερίων κυμαίνεται μεταξύ ελαφρώς πλουσίου (περίσσεια καυσίμου) και ελαφρώς πτωχού (περίσσεια οξυγόνου) μείγματος. Η αποτελεσματικότητα της μετατροπής αυτής, μειώνεται άμεσα όταν η μηχανή δουλεύει εκτός αυτής της ζώνης. Στη πτωχή λειτουργία κινητήρα, τα καυσαέρια περιέχουν περίσσεια οξυγόνου, έτσι δεν υπάρχει ευνοϊκό έδαφος για την αναγωγή του NO_x . Σε πλούσια λειτουργία κινητήρα, η περίσσεια του καυσίμου καταναλώνει όλο το διαθέσιμο οξυγόνο πριν τον καταλύτη, αφήνοντας έτσι διαθέσιμο μόνο το αποθηκευμένο οξυγόνο στον καταλύτη για να λάβει μέρος η λειτουργία της οξειδωσης.

Τα συστήματα ελέγχου μηχανής κλειστού κυκλώματος είναι αναγκαία για την αποτελεσματική λειτουργία των τριοδικών καταλυτικών μετατροπέων, λόγω της απαίτησης συνεχούς εξισορρόπησης για αποτελεσματική οξειδωση των HC και αναγωγή του NO_x . Το σύστημα ελέγχου πρέπει να αποτρέπει τη πλήρη οξειδωση στον αναγωγικό

καταλύτη των NO_x, όμως παράλληλα θα πρέπει να ανανεώνει το αποθηκευμένο οξυγόνο έτσι ώστε να διατηρείται η αποτελεσματικότητά του ως οξειδωτικού καταλύτη.

Οι τριοδική καταλυτική μετατροπείς έχουν τη δυνατότητα να αποθηκεύσουν οξυγόνο από τη ροή των καυσαερίων, συνήθως όταν ο λόγος αέρα-καυσίμου (air-fuel ratio) γίνεται πτωχός. Όταν δεν είναι διαθέσιμη επαρκής ποσότητα οξυγόνου από τη ροή εξόδου, απελευθερώνεται και καταναλώνεται το αποθηκευμένο οξυγόνο. Η έλλειψη αυτή, του επαρκούς οξυγόνου συμβαίνει είτε όταν το παραγόμενο οξυγόνο από την αναγωγή των NO_x δεν είναι διαθέσιμο είτε όταν συγκεκριμένοι ελιγμοί του μείγματος όπως έντονη επιτάχυνση εμπλουτίζουν το μείγμα πέρα από την ικανότητά του μετατροπέα να παρέχει οξυγόνο.

Στον τριοδικό καταλύτη μπορούν να συμβούν ανεπιθύμητες αντιδράσεις, όπως ο σχηματισμός δύσοσμου υδρόθειου και αμμωνίας. Ο σχηματισμός καθενός εκ των προϊόντων μπορεί να περιοριστεί με τροποποιήσεις στο ενδιάμεσο στρώμα καθώς και των χρησιμοποιούμενων πολύτιμων μετάλλων. Είναι δύσκολη η πλήρης εξάλειψη αυτών των παραπροϊόντων. Καύσιμα χωρίς θείο ή με χαμηλό θείο εξαλείφουν ή μειώνουν τα ποσοστά υδρόθειου.

Παραδείγματος χάρη, όταν στόχος περιορισμός των εκπομπών υδρόθειου, προστίθεται μαγγάνιο ή νικέλιο στο ενδιάμεσο στρώμα. Και τα δύο αυτά υλικά, δρουν παρεμποδίζοντας την προσρόφηση του θείου στο ενδιάμεσο στρώμα. Το υδρόθειο σχηματίζεται στο ενδιάμεσο στρώμα όταν αυτό έχει απορροφήσει θείο κατά τη διάρκεια της χαμηλής θερμοκρασίας του λειτουργικού κύκλου, που στη συνέχεια απελευθερώνεται κατά την υψηλή θερμοκρασία του κύκλου αυτού και το θείο συνδυάζεται με HC.

Η τριοδική καταλυτική χημεία αναφέρεται στις καταλυτικές αντιδράσεις που λαμβάνουν μέρος μέσα σε ένα καταλυτικό μετατροπέα, οι οποίες οδηγούν στην απομείωση των αέριων ρύπων που εκπέμπονται από τον κινητήρα ενός αυτοκινήτου.

Οι επιμέρους συνεισφορά του κάθε πολύτιμου μετάλλου, που ουσιαστικά αποτελούν την ενεργή φάση του TWC στις αντιδράσεις καταστροφής ρύπων έχουν ως εξής:

(i) Λευκόχρυσος (Pt)

Ο Λευκόχρυσος είναι ένας πολύ καλός καταλύτης για την μετατροπή των άκαυστων υδρογονανθράκων και του CO, αλλά δυστυχώς εμφανίζει αρκετά μικρή έως ασήμαντη δραστικότητα και πολύ χαμηλή N_2/N_2O -εκλεκτικότητα όσον αφορά τις αντιδράσεις αναγωγής των NOx.

Είναι πολύ ανθεκτικότερος σε δηλητηρίαση (απενεργοποίηση) από διάφορες προσμίξεις (μεταλλικά στοιχεία, S, κλπ) που εμπεριέχουν τα καυσαέρια. έναντι των άλλων δυο ευγενών μετάλλων.

(ii) Παλλάδιο (Pd)

Το Παλλάδιο είναι ένας καλός καταλύτης οξειδωσης του μονοξειδίου του άνθρακα (CO) και ακόμα καλύτερος στην οξειδωση των υδρογονανθράκων.

Η αναγωγική του δράση όσον αφορά τα NOx δεν είναι τόσο άσχημη όσο του λευκόχρυσου, εντούτοις δεν επαρκεί για να αποτελέσει την επιθυμητή λύση στον τριοδικό καταλυτικό μετατροπέα. (Η δυνατότητα διασπαστικής ρόφησης των οξειδίων του αζώτου από το παλλάδιο η οποία αποτελεί το εναρκτήριο βήμα για την αναγωγή των NOx, είναι άμεσα εξαρτωμένη από την θερμοκρασία και ευνοείται στα όρια των κρυστάλλων του παλλαδίου).

Εφόσον όμως το παλλάδιο είναι το πιο φθινό από τα άλλα ευγενή μέταλλα ενός καταλυτικού μετατροπέα, το πρακτικό και ερευνητικό ενδιαφέρον για την επέκταση της χρήσης του είναι υψηλό.

(iii) Ρόδιο (Rh)

Είναι ένα στοιχείο «κλειδί» του TWC για την αναγωγή των NOx, καθώς έχει την ικανότητα της σχεδόν ολοκληρωτικής διασπαστικής ρόφησης του NO.

Μάλιστα η N_2/N_2O -εκλεκτικότητα που επιτυγχάνεται με το ρόδιο, προσεγγίζει το 100%, ιδιαίτερα σε σχετικά υψηλές θερμοκρασίες.

Όμως, το Ρόδιο είναι πολύ σπανιότερο (βλέπετε εικόνα 4) των άλλων ευγενών μετάλλων (λευκόχρυσος, παλλάδιο) με αποτέλεσμα να είναι σημαντικά ακριβότερο. Ως εκ τούτου, κάθε ενέργεια που θα οδηγούσε σε ολική ή μερική αντικατάστασή του στον καταλυτικό μετατροπέα -χωρίς αυτό φυσικά να σημαίνει μείωση της απόδοσης της καταλυτικής διαδικασίας- θα είχε τεράστια οικονομικά οφέλη.

Η μείωση της χρήσης του Ρόδιου από περιβαλλοντικής άποψης θα ήταν επίσης επιθυμητή και για το λόγο του ότι θα αποφεύγαμε την διατάραξη άλλης μιας ισορροπίας της φύσης (ο κύριος καταναλωτής ρόδιου σήμερα είναι ο καταλυτικός μετατροπέας που το χρησιμοποιεί σε πολύ διαφορετικά ποσοστά, Rh/Pt=1:5 από αυτά που υποδεικνύει η φύση ≈1:15).

Ορυχείο	Pt	Pd	Rh
Merensky	19.6	8.3	1
UG	5.2	4.4	1
Platreef	14	15.3	1

Εικόνα 4: Η αναλογία των ευγενών μετάλλων στα ορυκτά της Ν. Αφρικής

(iv) Άλλα πιθανώς κατάλληλα ευγενή μέταλλα για την αναγωγή των NOx

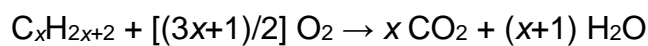
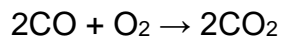
Υπάρχουν όμως και άλλα ευγενή μέταλλα που εμφανίζουν καλές ιδιότητες στις αντιδράσεις αναγωγής των NOx. Ωστόσο, για διαφορετικούς λόγους, η χρήση του κάθε μετάλλου κρίνεται απαγορευτική. Για παράδειγμα:

Το Ιρίδιο (Ir): Το ιρίδιο είναι ικανός καταλύτης για την αναγωγή του NO σε N₂ σε ελαφρώς οξειδωτικά περιβάλλοντα. Η σπανιότητά του όμως δεν επιτρέπει τη χρήση του ούτε σαν σκέψη. Αν μάλιστα ληφθεί υπόψη και το γεγονός ότι αυτό σχηματίζει με σχετική ευκολία πτητικά οξειδία που γρήγορα θα οδηγήσουν στην εξαφάνισή του από τον μετατροπέα, καθιστά τη χρήση του τουλάχιστον απαγορευτική.

Το Ρουθίνιο (Ru): Το ρουθίνιο είναι ένας και αυτός ένας καλός καταλύτης αναγωγής του NO προς N₂, αλλά κυρίως σε αναγωγικά περιβάλλοντα, που δεν είναι τα επιθυμητά (λόγω απώλειας καυσίμου) περιβάλλοντα σε ένα καταλυτικό μετατροπέα. Ένα επίσης μειονέκτημά, είναι ο ευχερής σχηματισμός πτητικών οξειδίων του ρουθινίου που θα μείωναν δραματικά το χρόνο παραμονής τους στον μετατροπέα.

1.5 Χρήση Καταλυτών

Μηχανές ντίζελ: Για ανάφλεξη μέσω συμπίεσης (compression-ignition, δηλαδή, κινητήρες ντίζελ), ο πιο συνηθισμένος καταλυτικός μετατροπέας είναι ο οξειδωτικός καταλύτης (diesel oxidation catalyst ή DOC). Οι DOCs περιέχουν λευκόχρυσο, παλλάδιο και οξείδιο του αργιλίου, που όλοι τους χρησιμεύουν ως καταλύτες ώστε να οξειδώσουν το μονοξείδιο του άνθρακα και τους υδρογονάνθρακες με οξυγόνο ώστε να σχηματίσουν διοξείδιο του άνθρακα και νερό.



Αυτοί οι μετατροπείς λειτουργούν με αποτελεσματικότητα περί το 90%, μειώνοντας ουσιαστικά το ποσοστό των ορατών σωματιδίων (τα γνωστά ως αιθάλη) και εξαλείφοντας την οσμή του ντίζελ. Αυτοί οι καταλύτες δεν είναι δραστικοί για την αναγωγή των NO_x επειδή η παρουσία οποιουδήποτε αναγωγικού μέσου θα αντιδρούσε πρώτα με την υψηλή συγκέντρωση του O_2 στα καυσαέρια του ντίζελ.

Η αναγωγή στις εκπομπές NO_x από μηχανές ανάφλεξης μέσω συμπίεσης είχε προηγουμένως αντιμετωπιστεί με ανακυκλοφορία καυσαερίων (EGR), δηλαδή την προσθήκη καυσαερίων στον εισερχόμενο αέρα. Το 2010, προκειμένου να καλυφθούν οι νέες ομοσπονδιακές απαιτήσεις εκπομπών καυσαερίων, οι περισσότεροι κατασκευαστές ντίζελ ελαφριάς χρήσης στις ΗΠΑ προσέθεσαν καταλυτικά συστήματα στα οχήματά τους. Έχουν αναπτυχθεί ουσιαστικά έως τώρα δύο τεχνικές για την καταλυτική αναγωγή των εκπομπών NO_x σε συνθήκες πτωχών καυσαερίων: η πτωχή παγίδα (lean trap) NO_x ή προσροφητής NO_x (NO_x adsorber), και η επιλεκτική καταλυτική αναγωγή (selective catalytic reduction ή SCR). Αντί της χρήσης προσροφητών NO_x που περιέχουν πολύτιμα μέταλλα, οι περισσότεροι κατασκευαστές επέλεξαν τη χρήση συστημάτων SCR με βάση μέταλλο που χρησιμοποιούν σαν αντιδραστήριο όπως η αμμωνία ώστε να ανάγουν τα NO_x σε άζωτο. Η αμμωνία τροφοδοτείται στο καταλυτικό σύστημα με την έγχυση ουρίας στα καυσαέρια, που στη συνέχεια λόγω της θερμικής αποσύνθεσης και υδρόλυσης που υφίσταται, μετατρέπεται σε αμμωνία. Ένα προϊόν εμπορικού σήματος τέτοιου διαλύματος (ουρίας), που αναφέρεται και σαν υγρό καυσαερίων ντίζελ (Diesel Exhaust Fluid ή DEF), είναι το AdBlue.

Τα καυσαέρια των ντιζελοκινητήρων (Diesel exhaust) περιέχουν υψηλά επίπεδα αιωρούμενων σωματιδίων (αιθάλης), σε σχέση με άλλους τύπους καυσαερίων, που αποτελούνται κυρίως από στοιχειακό άνθρακα. Οι καταλυτικοί μετατροπείς δεν μπορούν να καθαρίσουν τον στοιχειακό άνθρακα, αν και αφαιρούν έως και το 90% του διαλυτού οργανικού κλάσματος, και έτσι απαιτείται επιπρόσθετα παγίδα αιθάλης ή φίλτρο σωματιδίων ντίζελ για το καθαρισμό των σωματιδίων αυτών (diesel particulate filter ή DPF). Ιστορικά, τα τυπικά DPF αποτελούνταν από υπόστρωμα ανθρακοπυρίτιου (silicon carbide) ή κορδιερίτη (cordierite) με γεωμετρία που εξανάγκαζε τη ροή των καυσαερίων να εισέλθουν μέσα από τα τοιχώματα του υποστρώματος, αφήνοντας πίσω τα παγιδευμένα σωματίδια της αιθάλης. Τα σύγχρονα φίλτρα DPF ωστόσο κατασκευάζονται συνήθως από μια ποικιλία σπάνιων μετάλλων που παρέχουν ανώτερη απόδοση (με μεγαλύτερη ωστόσο δαπάνη). Καθώς η ποσότητα της παγιδευμένης αιθάλης στο DPF αυξάνεται, αυξάνεται και το φαινόμενο της αντίθλιψης (πίεση προς τα πίσω ή back pressure) στο σύστημα εξάτμισης. Για αυτό απαιτούνται περιοδικές αναγεννήσεις (διακυμάνσεις υψηλής θερμοκρασίας) για να ξεκινήσει η καύση της παγιδευμένης αιθάλης και συνεπώς η μείωση του φαινομένου αντίθλιψης στο σύστημα της εξάτμισης. Η ποσότητα των επικαθίσεων αιθάλης στον DPF πριν την αναγέννηση μπορεί επίσης να περιοριστεί ώστε να αποτρέψει ακραίες εξώθερμες συνθήκες που μπορεί να βλάψουν την παγίδα κατά τη διάρκεια της αναγέννησης.

Στις ΗΠΑ, όλα τα ελαφρά, μεσαία και βαριά ντιζελοκίνητα οχήματα που κατασκευάστηκαν μετά την 1 Ιανουαρίου 2007, πρέπει να συμμορφώνονται με τους κανονισμούς εκπομπών σωματιδίων, που σημαίνει ότι θα πρέπει να είναι εφοδιασμένα με διοδικό καταλυτικό μετατροπέα καθώς και φίλτρο σωματιδίων. Αυτό ισχύει μόνο για το ντίζελ κινητήρα που φέρει ένα νέο όχημα. Εάν το όχημα κατασκευάστηκε πριν την 1η Ιανουαρίου 2007, δεν απαιτείται το όχημα να έχει σύστημα DPF. Αυτό οδήγησε σε άλμα των αποθεμάτων των κατασκευαστών μηχανών κατά το 2006, έτσι ώστε να μπορούν να συνεχίσουν την πώληση οχημάτων χωρίς φίλτρα DPF το 2007. Κατά τη διάρκεια του κύκλου αναγέννησης, απαιτείται από το αυτοκίνητο η κατανάλωση περισσότερου καυσίμου σε σχετικά σύντομο χρονικό διάστημα για να δημιουργήσουν απαραίτητες συνθήκες υψηλών θερμοκρασιών για την ολοκλήρωση του κύκλου. Αυτό επηρεάζει δυσμενώς τη μέση συνολική οικονομία του καυσίμου των οχημάτων που είναι εφοδιασμένα με συστήματα

DPF, ιδιαίτερα σε οχήματα που οδηγούνται ως επί το πλείστον σε συνθήκες πόλης όπου συχνές επιταχύνσεις απαιτούν μεγαλύτερες ποσότητες καύσης και συνεπώς συλλογή περισσότερης αιθάλης στα σύστημα καυσαερίων.

Μηχανές ανάφλεξης με σπινθήρα πτωχής καύσης

Για τις μηχανές ανάφλεξης με σπινθήρα πτωχού μείγματος (lean-burn spark-ignition engines), χρησιμοποιείται συνήθως ένας καταλύτης οξειδωσης όπως και στις μηχανές ντίζελ. Οι εκπομπές από μηχανές ανάφλεξης με σπινθήρα πτωχού μείγματος θυμίζουν αυτές των μηχανών ντίζελ ανάφλεξης με συμπίεση.

1.6 Απενεργοποίηση των καταλυτικών μετατροπών

Η απόδοση ενός καταλυτικού μετατροπέα υποβαθμίζεται με τον χρόνο για δύο κυρίως λόγους:

- εξαιτίας της σταδιακής δηλητηρίασης (απενεργοποίησης) των δραστικών μετάλλων στο χρόνο
- εξαιτίας της θερμικής γήρανσης που υφίσταται.

Το φαινόμενο της δηλητηρίασης οφείλεται στην κατασταλτική δράση ορισμένων στοιχείων που υπάρχουν στα καύσιμα όπως ο μόλυβδος (Pb), ο φώσφορος (P), το μαγγάνιο (Mn), το θείο (S), ο άνθρακας, κτλ, τα οποία προσροφούνται ισχυρά πάνω στην ενεργή επιφάνεια των ευγενών μετάλλων, προκαλώντας έτσι ελάττωση της καταλυτικά ενεργής επιφάνειας και έτσι μείωση της απόδοσης του TWC. Ο φώσφορος περιέχεται σε μικρές ποσότητες στα καύσιμα ($\approx 0.002-0.1$ mg/l), αλλά παράγεται και από την ανεπιθύμητη καύση των λιπαντικών μιας μηχανής, όπου εντοπίζονται σε μεγαλύτερες ποσότητες (1.2 g/l). Η αμόλυβδη βενζίνη περιέχει μικρές ποσότητες μόλυβδου (περίπου 1 mg/l). Τα καυσαέρια περιέχουν περίπου 20 ppm θείου υπό μορφή SO₂. Το Μαγγάνιο είναι πρόσθετο της βενζίνης με σκοπό την βελτίωση των αντικροτικών (anti-knock) ιδιοτήτων της.

Από την άλλη έχουμε τη θερμική γήρανση. Η λειτουργία ενός καταλυτικού μετατροπέα σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες προκαλεί σοβαρή υποβάθμιση της απόδοσής του. Οι υψηλές αυτές θερμοκρασίες ευνοούν τη σύντηξη των κρυσταλλινών στα ευγενή μέταλλα, δηλ., την ελάττωση της ενεργής επιφάνειας του καταλύτη: Ευνοείται κυρίως μια κραματοποίηση

του ρόδιου με το παλλάδιο. Το κράμα που προκύπτει εμφανίζει σημαντικά μειωμένη εκλεκτικότητα και δραστηριότητα στις σχετικές αντιδράσεις.

Θερμοκρασίες λειτουργίας μεγαλύτερες από 900°C προκαλούν σε βραχύ χρονικό διάστημα εκτεταμένες ζημιές στον καταλύτη. Αν και ο TWC λειτουργεί σε μια μέση θερμοκρασία ≈400-450°C, μεγαλύτερες θερμοκρασίες της τάξης των 900°C δεν μπορούν εύκολα να αποφευχθούν, ιδιαίτερα όταν η λειτουργία του κινητήρα δεν είναι η αναμενόμενη (τρόπος οδήγησης, άκαυστο καύσιμο, κλπ).

1.7 Αδυναμίες της τεχνολογίας των TWCs

Παρόλο που η τεχνολογία των τριοδικών καταλυτικών μετατροπών παρέχει μια ικανοποιητική λύση για την αντιμετώπιση της ρύπανσης από το αυτοκίνητο, η μακρόχρονη πλέον εμπειρία από την χρήση της (>40 ετών) υποδεικνύει ορισμένες αδυναμίες τις οποίες παρουσιάζει.

Για αυτό και αναζητούνται λύσεις για το πρόβλημα της περιβαλλοντικής στα εν λόγω προβλήματα που παρατίθενται παρακάτω:

Κόστος TWC, χρήση Ρόδιου: Το κόστος των εμπορικών TWC είναι αρκετά υψηλό για δυο λόγους: έχουν σχετικά μεγάλη ποσότητα ευγενών μετάλλων και χρησιμοποιείται αναγκαστικά το σπάνιο και ακριβό ρόδιο για την αναγωγή των NOx. Είναι επομένως προφανές ότι οποιαδήποτε ενέργεια που θα έφερε ως αποτέλεσμα την ενίσχυση των καταλυτικών ιδιοτήτων των ευγενών μετάλλων που χρησιμοποιούνται από έναν καταλυτικό μετατροπέα καθώς και η ταυτόχρονη μείωση ή αντικατάσταση του σπάνιου και ακριβού ρόδιου, χωρίς αυτή η ενέργεια να επιβαρύνει την αποδοτικότητα ενός μετατροπέα, θα μεταφραζόταν σε σημαντική ελάττωση του κόστους.

Παραγωγή ανεπιθύμητου υποξειδίου του αζώτου (N₂O): Οι αντιδράσεις που αφορούν την αναγωγή των NOx, εκτός από τον σχηματισμό του επιθυμητού αζώτου (N₂) οδηγούν δυστυχώς και στην παραγωγή και του ανεπιθύμητου υποξειδίου του αζώτου, σε ποσοστά που σε ορισμένες περιπτώσεις, πλησιάζουν έως και το 20% της συνολικής μετατροπής του NO. Καθόσον είναι πλέον γνωστή η δράση του υποξειδίου του αζώτου στην καταστροφή του στρατοσφαιρικού όζοντος και οι αρνητικές συνέπειες του στο φαινόμενο του θερμοκηπίου: οποιαδήποτε βελτίωση της εκλεκτικότητας των μετατροπών κατά την

αναγωγή των NOx προς την κατεύθυνση παραγωγής αζώτου αντί του υποξειδίου του αζώτου θα ήταν άκρως ευεργετική.

Σχεδόν αντισυμβατική και δύσκολη η ανακύκλωση των TWCs: Εξαιτίας της παρουσίας συνήθως τριών ευγενών μετάλλων στην κατασκευή και σύνθεση των εμπορικών καταλυτικών μετατροπέων, η ανακύκλωσή τους με στόχο τον διαχωρισμό των ευγενών μετάλλων προς ανακύκλωση/επαναχρησιμοποίηση απαιτεί πολύπλοκες και δύσκολες διεργασίες. Αυτό οφείλετε κυρίως στις παρεμφερείς φυσικοχημικές ιδιότητες των μετάλλων αυτών μεταξύ τους, πράγμα που δυσχεραίνει τον διαχωρισμό τους. Το γεγονός αυτό έχει σαν αποτέλεσμα η διαδικασία της ανακύκλωσης των TWCs να παρουσιάζεται με ελαφρά θετικό οικονομικό όφελος ή να είναι έως και αντισυμβατική, χωρίς κατάλληλες προϋποθέσεις για παρακίνηση επενδύσεων προς αυτή την κατεύθυνση. Όμως εάν δεν πραγματοποιείται ανακύκλωση των TWCs δημιουργούνται σημαντικά προβλήματα διαταραχών των ισορροπιών της φύσης και περιβαλλοντικής μόλυνσης, καθόσον η κατανάλωση των καταλυτικών μετατροπέων είναι τεράστια. Θα πρέπει να βρεθούν νέες φόρμουλες σύστασης των TWCs που θα παρουσιάζουν ευκολότερη και οικονομικότερη διαδικασία ανακύκλωσης.

Διάρκεια ζωής (ικανοποιητικής λειτουργίας) των TWCs: Οι εμπορικοί καταλυτικοί μετατροπείς έχουν ένα εύρος χρόνου ζωής (στον οποίο λειτουργούν επαρκώς) που αντιστοιχεί σε περίπου 100,000 χλμ. χρήσης. Αυτός ο αριθμός αφορά μια υποτιθέμενη καλή λειτουργία του αυτοκινήτου σε καλό οδικό δίκτυο. Σε αντίθετη περίπτωση ο χρόνος ζωής του μετατροπέα μπορεί να μειωθεί μέχρι και στο ήμισυ αυτού.

Σε πραγματικές συνθήκες οδήγησης και δικτύου της Ελλάδος μια εκτίμηση του χρόνου ζωής αντίστοιχο των $\approx 60,000$ km είναι μάλλον ρεαλιστική. Εν γένει, μια γενικότερη βελτίωση των καυσίμων και αύξηση της αντοχής των μελλοντικών TWCs έναντι των δηλητηριάσεων θα έχει οικονομικά και περιβαλλοντικά οφέλη.

1.8 Περιβαλλοντική Κατάλυση και Σύγχρονες Ερευνητικές Τάσεις ("Εργαστήριο Φυσικοχημείας και Χημικών Διεργασιών: Προπτυχιακό επίπεδο", 2021)²

Η επιστήμη της Περιβαλλοντικής Κατάλυσης, δραστηριοποιείται έντονα με την ανάπτυξη νέων καταλυτικών συστημάτων που θα έχουν ενισχυμένη απόδοση και εκλεκτικότητα για:

- (i) τις αντιδράσεις αναγωγής των οξειδίων του αζώτου,
- (ii) τις αντιδράσεις πλήρους καταλυτικής οξείδωσης των πτητικών οργανικών ενώσεων και των υδρογονανθράκων που απαντώνται στις διάφορες εκπομπές (κυρίως διεργασιών καύσης),
- (iii) τις αντιδράσεις καταλυτικής καταστροφής αρωματικών και κυκλικών ενώσεων,
- (iv) τις αντιδράσεις ελέγχου των SO_x, και εν γένει όλων αυτών των αντιδράσεων που έχουν ως στόχο τον περιορισμό των βλαβερών εκπομπών από διάφορες διεργασίες καύσης ή παραγωγής βιομηχανικών προϊόντων.

Εφόσον ένα μεγάλο ποσοστό της ρύπανσης της ατμόσφαιρας προέρχεται από τα αυτοκίνητα, η περιβαλλοντική κατάλυση στρέφεται κυρίως στις αντιδράσεις οι οποίες σχετίζονται με τον έλεγχο των καυσαερίων των αυτοκινήτων, ήτοι τις αντιδράσεις κυρίως των κατηγοριών (i) και (ii). Τα καινοτόμα καταλυτικά υλικά που συνεχώς αναπτύσσονται πρέπει να παρουσιάζουν αναβαθμισμένες καταλυτικές ιδιότητες σε τέτοιο βαθμό που θα ανταποκρίνονται ικανοποιητικά στους συνεχώς αυστηρότερους κανονισμούς που θεσπίζονται. Από την άλλη πλευρά επιδιώκεται τα νέα αυτά τεχνολογικά προϊόντα να είναι οικονομικότερα από τα υπάρχοντα.

Στη συνεχή προσπάθεια της Περιβαλλοντικής Κατάλυσης για την ανάπτυξη αποτελεσματικότερων καταλυτικών μετατροπών αυτοκινήτων από των υπάρχόντων, παρουσιάζονται κάθε χρόνο περισσότερες από 50 δημοσιεύσεις και περίπου 5 νέες πατέντες.

Οι προσπάθειες αυτές εντοπίζονται ως επί τω πλείστων στις παρακάτω κατευθύνσεις:

- Στην προαγωγή των καταλυτικών ιδιοτήτων των ευγενών μετάλλων, σε αντιδράσεις που λαμβάνουν μέρος εντός του καταλυτικού μετατροπέα, με τη χρήση ενεργών φορέων.

- Στην προαγωγή των καταλυτικών ιδιοτήτων των ευγενών μετάλλων με τη χρήση προωθητών.
- Χρήση προσθέτων ουσιών εντός του wash coat (ντοπάρισμα φορέα) που επαυξάνουν την εκλεκτικότητα, την ενεργότητα και την αντοχή των ευγενών μετάλλων.
- Ανεύρεση πλήρως νέων καταλυτών (κατά προτίμηση μη-ευγενών μετάλλων)

Παρακάτω αναλύονται εν συντομία οι κλασσικοί και μοντέρνοι τρόποι οι οποίοι έχουν αναπτυχθεί από την επιστήμη της ετερογενούς κατάλυσης για να βελτιώσει, δηλαδή να ενισχύσει την απόδοση των καταλυτών. Το πεδίο αυτό ονομάζεται ενίσχυση ή προώθηση στην κατάλυση και έχει μια μακροχρόνια ιστορία στην ανάπτυξη αποτελεσματικότερων βιομηχανικών καταλυτών. Παραμένει, μέχρι και σήμερα ένας τομέας τεράστιου ερευνητικού και τεχνολογικού ενδιαφέροντος.

Μορφή των ετερογενών καταλυτών όσων αφορά την πρακτική εφαρμογή

Οι ετερογενείς καταλύτες απαρτίζονται από τρία μέρη:

- την καταλυτικά ενεργή φάση (active phase),
- τον φορέα (γνωστό και ως support ή carrier), που είναι υλικό μεγάλης επιφάνειας ($\approx 10-2000 \text{ cm}^2/\text{gr}$) πάνω στον οποίο διασπείρεται σε λεπτό διαμελισμό η ενεργός φάση,
- τον προωθητή (promoter), υλικό το οποίο αν και από μόνο του έχει ασήμαντη έως μηδενική καταλυτική ενεργότητα στην εν λόγω αντίδραση, όταν χρησιμοποιηθεί ως πρόσθετο μπορεί και «μεταμορφώνει» εξαιρετικά αποτελεσματικά την ενεργό φάση, ενισχύοντας έως και δραματικά, σε ορισμένες περιπτώσεις, τις καταλυτικές της ιδιότητες.

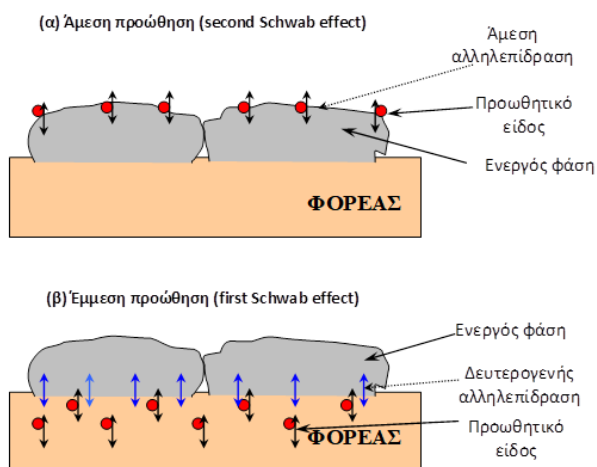
Τρόποι προώθησης ή ενίσχυσης καταλυτών

α)Κλασσική προώθηση: Η κλασσική προώθηση στην κατάλυση πραγματοποιείται με δυο κυρίως τρόπους:

- την επιφανειακή ή απευθείας προώθηση (surface or direct promotion; second Schwab effect) κατά την οποία ο προωθητής διασπείρεται στην επιφάνεια της

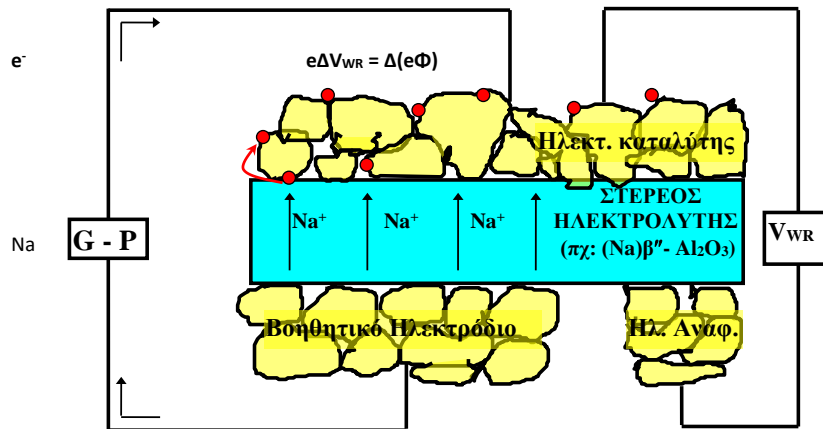
ενεργούς φάσης, αλληλεπιδρά στερεοχημικά και ηλεκτρονιακά απευθείας με αυτήν, επηρεάζοντας έτσι την καταλυτική συμπεριφορά των ενεργών κέντρων, — την έμμεση προώθηση (support mediated promotion; first Schwab effect) δηλαδή η προωθητική ουσία αναμιγνύεται στον φορέα, τροποποιώντας την δομή και τις φυσικοχημικές ιδιότητες του φορέα, και στη συνέχεια η αλληλεπίδραση αυτή μεταβιβάζεται δευτερογενώς στην ενεργό φάση που βρίσκεται σε επαφή με τον τροποποιημένο φορέα (φαινόμενο DIMSI: Dopant Induced Metal Support Interactions).

Οι δυο μέθοδοι προώθησης, άμεση και έμμεση δείχνονται παραστατικά στα παρακάτω σχήματα. Ας σημειωθεί ότι στην ετερογενή κατάλυση υπάρχουν και άλλοι τρόποι προώθησης, όπως πχ η δημιουργία κραμάτων ενεργούς φάσεως, όπως επίσης και κάποιες μοντέρνες μέθοδοι που έχουν προταθεί πρόσφατα και βρίσκουν ήδη ευρεία εφαρμογή.



Εικόνα 5: Άμεσος και έμμεσος τρόπος προώθησης των καταλυτών(α&β)

β) Ηλεκτροχημική προώθηση ή Φαινόμενο NEMCA: Η Ηλεκτροχημική Προώθηση (Electrochemical Promotion) ή αλλιώς Φαινόμενο NEMCA (Non-Faradaic Electrochemical Modification of Catalytic Activity) είναι ένας απόλυτα ελεγχόμενος (με ηλεκτροχημικό τρόπο), επιτόπιος και αντιστρεπτός τρόπος προώθησης, επιφανειακού τύπου (σχήμα α στην εικόνα άνωθεν), ο οποίος επιβάλλεται και ελέγχεται μέσω της χρήσης ενός κατάλληλου ηλεκτροχημικού στοιχείου το οποίο δημιουργείται. Δείχνεται παραστατικά στην εικόνα που ακολουθεί.



Εφαρμογή ρεύματος → Διοχέτευση προωθητικών ειδών προς την καταλυτική επιφάνεια
 ↓
 Τροποποίηση της ηλεκτρονιακής διαθεσιμότητας της επιφάνειας → τροποποίηση των χαρακτηριστικών χημορρόφησης των αντιδρώντων στην επιφάνεια
 ↓
 Τροποποίηση του καταλυτικού ρυθμού:
 $\ln(r/r_0) = \alpha \Delta(e\Phi)/k_b T$

Εικόνα 6: Μεθοδολογία, μηχανισμός και αναπαράσταση ηλεκτροχημικού στοιχείου μέσω του οποίου επιτυγχάνεται η εφαρμογή της Ηλεκτροχημικής Προώθησης

Ενίσχυση καταλυτικών ιδιοτήτων μέσω της τροποποίησης φορέων

Οι φορείς (γνωστοί και ως carriers ή supports) που χρησιμοποιούνται στην ετερογενή κατάλυση για την διασπορά των ενεργών φάσεων του καταλύτη δεν είναι πάντοτε «αθώα» υλικά. Συχνά, μπορούν και προκαλούν σημαντικές επιδράσεις επί των καταλυτικών ιδιοτήτων (εκλεκτικότητα, ενεργότητα) των ενεργών φάσεων που υποστηρίζονται σε αυτούς. Στην κατάλυση, το φαινόμενο αυτό είναι γνωστό ως Metal-Support Interactions (MSI) και έχει παρατηρηθεί σε πληθώρα ετεροκαταλυτικών συστημάτων (αντίδραση/καταλύτης).

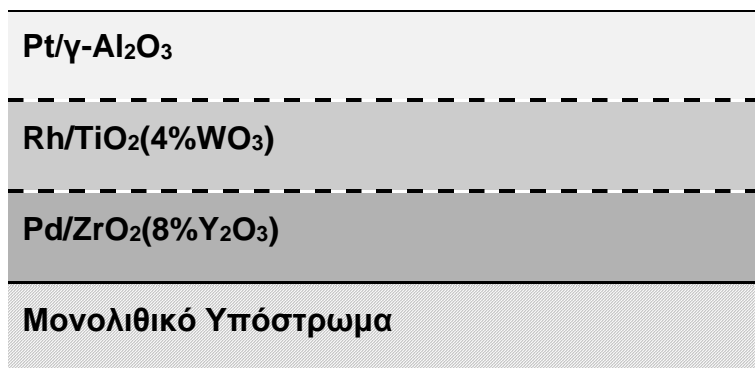
Όσον αφορά την παρούσα εφαρμογή, δηλαδή τον έλεγχο των εκπομπών από την χρήση συμβατικών καυσίμων, σε μια λεπτομερειακή μελέτη της επίδρασης διαφόρων συνηθισμένων φορέων επί των καταλυτικών ιδιοτήτων των μετάλλων λευκόχρυσος, παλλάδιο και ρόδιο που έγινε πρόσφατα, στις αντιδράσεις της τριοδικής καταλυτικής χημείας παρατηρήθηκαν έντονες επαυξήσεις των ρυθμών και της εκλεκτικότητας από ορισμένους φορείς.

Έτσι σχεδιάστηκε ένας “Προηγμένης Τεχνολογίας Καταλυτικός Μετατροπέας Αυτοκινήτων (ΠΤ-ΚΜΑ)” ο οποίος είναι σημαντικά φθηνότερος και αποτελεσματικότερος

των εμπορικών. Αυτός αποτελείται από μονόλιθο κορδιερίτη ο οποίος είναι επικαλυμμένος από τρία διαδοχικά ενεργά στρώματα όπως δείχνεται στην εικόνα 7 που ακολουθεί. Κάθε ένα από αυτά τα επιμέρους στρώματα περιέχει ένα από τα ευγενή μέταλλα, τα οποία είναι υποστηριγμένα σε φορείς που προωθούν στην ενεργότητά τους, αυξάνοντάς την ενίοτε έως και 2 τάξεις μεγέθους, σε αντιδράσεις που αφορούν την καταστροφή των ρύπων του αυτοκινήτου. Έχει παρατηρηθεί ότι: ο Λευκόχρυσος υποστηριγμένος σε $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, το ρόδιο σε $\text{TiO}_2(4\% \text{WO}_3)$ και το παλλάδιο σε $\text{ZrO}_2(8\% \text{Y}_2\text{O}_3)$, εμφανίζουν έντονα αυξημένη εκλεκτικότητα/ενεργότητα, σε σχέση με την ενεργότητα που τα μέταλλα αυτά εμφανίζουν όταν υποστηριχθούν αποκλειστικά σε $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, όπως συνηθίζεται στους τυπικούς καταλυτικούς μετατροπής του εμπορίου (σχήμα 8).

Οι φορείς αυτοί, φαίνονται να ανταποκρίνονται καλύτερα από μια ομάδα έξι επιλογών που συχνά χρησιμοποιούνται ως φορείς στην κατάλυση (δηλ. SiO_2 , $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, TiO_2 , doped- TiO_2 , ZrO_2 , και doped- ZrO_2).

Από την άλλη όμως πλευρά η τοποθέτηση του ενεργού στρώματος $\text{Pt}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ στην εξωτερική στοιβάδα (εικόνα 7) έχει ως αποτέλεσμα την προστασία των ευαίσθητων σε δηλητηρίαση μετάλλων όπως του ρόδιου και παλλάδιου που αποτελούν τα κατώτερα στρώματα στον Προηγμένης Τεχνολογίας Καταλυτικό Μετατροπέα Αυτοκινήτων (ΠΤ-ΚΜΑ). (Ο Λευκόχρυσος εμφανίζεται σημαντικές ανθεκτικές ιδιότητες στην δηλητηρίαση από τα καυσαέρια των αυτοκινήτων).



Εικόνα 7: Ο Προηγμένης Τεχνολογίας Καταλυτικός Μετατροπέας Αυτοκινήτων

(Pt, Rh, Pd)/[γ -Al₂O₃ (CeO₂, La₂O₃)]

Μονολιθικό Υπόστρωμα

Εικόνα 8: Ο εμπορικός καταλυτικός μετατροπέας αυτοκινήτων

Ο τυπικός καταλυτικός μετατροπέας του εμπορίου υφίσταται μια σημαντική πτώση ενεργότητας λόγω χρήσης, η οποία οφείλεται σε σύντηξη (κραματοποίηση) των ενεργών φάσεων των μετάλλων που βρίσκονται σε επαφή. Αντιθέτως, ο ΠΤ-ΚΜΑ δεν υπόκειται σε τέτοια φαινόμενα με τη προϋπόθεση ότι τα ευγενή μέταλλα βρίσκονται σε σαφώς διαχωρισμένα στρώματα (εικόνα 7).

1.9 Ο Σκοπός της Εργασίας

Οι καταλύτες επηρεάζουν τη ροή των καυσαερίων και την απόδοση των ΜΕΚ λόγω του φαινομένου υποπίεσης και της θερμικής καταπόνησης του ίδιου. Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η διερεύνηση του φαινομένου της υποπίεσης και της συμπεριφοράς του καταλύτη συναρτήσει της πυκνότητας των κυψελών του (CPSI) και του πάχους των τοιχωμάτων.

1.10 Η Δομή της Εργασίας

Η συγκεκριμένη εργασία αναπτύσσεται σε 5 ενότητες - κεφάλαια. Στο πρώτο κεφάλαιο αναλύονται ορισμένα εισαγωγικά στοιχεία για τους καταλύτες, την ιστορία και τα είδη του και τα συστατικά του μέρη καθώς και τη χρήση και τις αδυναμίες τους. Περιγράφεται ακολούθως το αντικείμενο της εργασίας, όπως και η διάρθρωσή της.

Στο δεύτερο κεφάλαιο παρουσιάζεται η βιβλιογραφική επισκόπηση. Δηλαδή, περιγράφονται τα βασικά άρθρα και εργασίες τα οποία αποτέλεσαν τη βάση και το θεωρητικό υπόβαθρο πάνω στο οποίο στηρίχτηκε η διπλωματική.

Στο τρίτο κεφάλαιο περιγράφεται η μεθοδολογία της έρευνας. Δηλαδή, περιγράφονται οι βασικές αρχές της έρευνας καθώς και η διαδικασία ανάπτυξής της, ο τρόπος σχεδίασης των καταλυτών, τα οποία στη συνέχεια μελετήθηκαν.

Στο τέταρτο κεφάλαιο παρουσιάζεται οι αναλύσεις και η εξαγωγή των βασικότερων συμπερασμάτων, μέσα από το σχολιασμό των εξαγόμενων αποτελεσμάτων.

Στο τελευταίο κεφάλαιο παρουσιάζονται τα συνολικά συμπεράσματα της έρευνας, γίνονται εισηγήσεις για περαιτέρω έρευνα και διατυπώνονται και οι υφιστάμενοι περιορισμοί της παρούσας εργασίας.

Στο τέλος του τεύχους αναφέρονται οι βασικές πηγές από τη βιβλιογραφία, οι οποίες χρησιμοποιήθηκαν για τη συγγραφή της διπλωματικής αυτής εργασίας και το παράρτημα Ι με τα σχέδια των καταλυτών που χρησιμοποιήθηκαν στις αναλύσεις.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

2. Βιβλιογραφική Επισκόπηση

Στη συγκεκριμένη παράγραφο παρουσιάζεται η βιβλιογραφική επισκόπηση των άρθρων που μελετήθηκαν για την ολοκλήρωση της έρευνας. Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται προηγούμενες εργασίες σχετικές με το εξεταζόμενο θέμα, ώστε να κατανοηθεί το αντικείμενο και να βρεθεί ο κατάλληλος τρόπος προσέγγισής του.

Τα βασικά θέματα που καλύπτει η βιβλιογραφία αναφέρονται σε παρόμοιες εργασίες που μελετούν πώς η δομή του καταλύτη επηρεάζει τη ροή, την απόδοση και τις πιέσεις ενώ οι περισσότερες αναλύσεις έχουν γίνει με τη χρήση του Ansys και Chemkin.

2.1 Εργασίες για τη μελέτη της ροής σε ένα καταλυτικό μετατροπέα

Στην εργασία τους οι Schweich και Leclerc (Schweich & Leclerc, 1991)³ μελετούν τη ροή σε ένα καταλύτη. Οι μονολιθικοί μετατροπείς λειτουργούν συχνότερα σε μεταβατική κατάσταση (transient state) ανάλογα τη σύνθεση, το ρυθμό ροής, τη θερμοκρασία κ.λπ. Υπάρχουν πολλές αντιδράσεις και αυτές οι αντιδράσεις ανταγωνίζονται τις διαδικασίες μεταφοράς θερμότητας και μάζας. Ομοίως με τους καταλυτικούς αντιδραστήρες της χημικής βιομηχανίας, ο χρήστης θέλει υψηλές μετατροπές των αντιδρώντων. Ωστόσο, σε αντίθεση με τους βιομηχανικούς αντιδραστήρες, ο χρήστης δεν έχει πολλές μεταβλητές λειτουργίας όπως ο χρόνος, οι θερμοκρασίες τροφοδοσίας και ψυκτικού, κ.λπ. Η μόνη διαθέσιμη "παράμετρος λειτουργίας" είναι μια σαφής επιστημονική κατανόηση του τι συμβαίνει, προκειμένου να σχεδιαστεί σωστά ο αντιδραστήρας. Αυτή η εργασία περιγράφει την παρούσα κατάσταση αυτής της επιστημονικής γνώσης.

2.2 Εργασίες για τη μοντελοποίηση με CFD

Για τη μείωση του επιπέδου εκπομπών, ο μονολιθικός τριοδικός καταλυτικός μετατροπέας (TWC) έχει υιοθετηθεί ευρέως σε διάφορους κινητήρες καύσης. Για το σχεδιασμό οποιουδήποτε καταλυτικού μετατροπέα πρέπει να ληφθούν υπόψη πολλοί παράγοντες και είναι μια πολύ περίπλοκη διαδικασία που περιλαμβάνει τη βελτιστοποίηση διαφορετικών χημικών και φυσικών παραμέτρων. Η καταλυτική

απόδοση ενός μετατροπέα επηρεάζεται εύκολα από διάφορες παραμέτρους όπως πυκνότητα κυψελών, μήκος, κάλυψη μετάλλου, σύνθεση καυσίμου, κ.λπ. Στην εργασία με τίτλο CFD Modeling of the Automobile Catalytic Converter (Premkumar, Aravinthasamy, Balaji, Boopathiraja & Dhinesh, 2019)⁴ έχει πραγματοποιηθεί τρισδιάστατη ανάλυση CFD με χρήση του ANSYS Fluent. Η απόδοση και συμπεριφορά του μετατροπέα έχουν μελετηθεί βάσει της αποδοτικότητας μετατροπής. Οι εξισώσεις που διέπουν το πρόβλημα επιλύονται με τη χρήση FLUENT solver, ο οποίος συνδυάζεται περαιτέρω με μοντέλο επιφανειακής αντίδρασης. Τα χαρακτηριστικά της ροής σε διάφορα τμήματα κατά μήκος του καταλυτικού μετατροπέα απεικονίζονται μαζί με την προσομοίωση ετερογενούς αντίδρασης εντός του μετατροπέα. Τα αποτελέσματα συγκρίνονται με την προηγούμενη πειραματική εργασία άλλων και παρουσιάζουν αποτελέσματα είναι εντός αποδεκτού ορίου. Τα βασικά συμπεράσματα είναι τα ακόλουθα: σύμφωνα με τον τύπο του κινητήρα, η διοχέτευση των εκπομπών στην ατμόσφαιρα μέσω ενός σωλήνα εξάτμισης είναι διαφορετική. Οι εκπομπές μπορούν να μειωθούν με τη χρήση καταλυτικού μετατροπέα. Ακόμη και αν ο καταλυτικός μετατροπέας χρησιμοποιείται, ο ίδιος εμφανίζει το πρόβλημα της αύξησης της αντίθλιψης. Ακόμη, οι εκπομπές και η αντίθλιψη εντοπίζονται με διαφορετική ταχύτητα. Η αντίθλιψη που ασκείται από τον καταλυτικό μετατροπέα κατά τη διάρκεια της κατάστασης λειτουργίας προκαλεί τη μείωση της ογκομετρικής απόδοσης και οδηγεί σε αύξηση της κατανάλωσης καυσίμου. Έτσι, η αντίθλιψη μειώνεται χρησιμοποιώντας το κιβώτιο αέρα, με το οποίο ο ατμοσφαιρικός αέρας εισέρχεται στις εκπομπές καυσαερίων αυξάνοντας έτσι την απόδοση του κινητήρα καθώς και την απόδοση και την αντοχή του καταλυτικού μετατροπέα.

Ακόμη μια εργασία που μελετά την επίδραση του κιβωτίου αέρα είναι η ακόλουθη (Priyadarsini, Indira & Muralikrishna, M & Ushasri, Dr., 2019). Το μοντέλο δημιουργήθηκε από το ANSYS Workbench και η ανάλυση πραγματοποιήθηκε στο Fluent. Το υπόστρωμα μοντελοποιείται ως πορώδες μέσο και οι συνθήκες ορίου ροής μάζας και θερμοκρασίας εφαρμόζονται χρησιμοποιώντας αναλυτικούς υπολογισμούς. Ο μετατροπέας είναι εξοπλισμένος με κιβώτιο αέρα για περαιτέρω αύξηση της τυρβώδους ροής μειώνοντας έτσι τις εκπομπές ρύπων. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι ο μετατροπέας με κουτί αέρα είχε καλύτερη απόδοση

από τον μετατροπέα χωρίς κιβώτιο αέρα. Τα υπολογιστικά αποτελέσματα έδειξαν ότι η ταχύτητα ήταν ομοιόμορφη στην πορώδη περιοχή με καλύτερο ρυθμό μετατροπής των ρύπων και το μονοξείδιο του άνθρακα και οι άκαυστοι υδρογονάνθρακες μειώθηκαν.

Στην επόμενη εργασία (Ramasubramanian, Ganesh & Karikalan, 2019)⁵ οι συγγραφείς έχοντας διαπιστώσει πως η παρουσία καταλυτικού μετατροπέα στο σύστημα εξάτμισης επηρεάζει τη ροή καυσαερίων από τους κινητήρες εσωτερικής καύσης προχώρησαν σε μία πρόταση. Η πρόταση αυτή είναι ένας βελτιωμένος σχεδιασμός του μονόλιθου που υπάρχει στον καταλυτικό μετατροπέα, ο οποίος εξυπηρετεί καλύτερο ρυθμό ροής από το συμβατικό σχεδιασμό. Τα συμβατικά και βελτιωμένα μοντέλα δημιουργήθηκαν σε CAD και αναλύονται στο ANSYS με επίλυση FLUENT. Τα αποτελέσματα ροής παρέχονται ως συγκρίσεις μεταξύ συμβατικού σχεδιασμού και νέου βελτιωμένου σχεδιασμού. Ο προτεινόμενος νέος σχεδιασμός με αλλαγή σχήματος παρέχει βελτιωμένη ροή υγρού από το συμβατικό μοντέλο. Το διάγραμμα ταχύτητας του νέου προτεινόμενου σχήματος έχει ομοιόμορφη κατανομή σε σύγκριση με το συμβατικό μοντέλο. Το διάγραμμα της πίεσης του συμβατικού μοντέλου έχει μεγαλύτερη κατανομή πίεσης μετά το τμήμα του λαιμού εισόδου και πολύ μειωμένο κοντά στο τμήμα εξόδου. Ωστόσο, το διάγραμμα πίεσης του νέου σχήματος έχει ομαλή μετάβαση λόγω του σχεδιασμού του οδηγώντας έτσι σε μια ομοιόμορφη κατανομή πίεσης. Παρομοίως, η ένταση του τυρβώδους ροής είναι περισσότερο στο συμβατικό μοντέλο ενώ στο προτεινόμενο μοντέλο η κατανομή είναι ομοιόμορφη.

2.3 Εργασίες για τη μοντελοποίηση με Ansys Chemkin

Ακολούθως, παρουσιάζεται ακόμη μία εργασία με τίτλο CFD Analysis of Catalytic Converter for Mitigation of Emission (Vaghela, Jigar & Jejurkar, Avdhoot, 2018)⁶. Η εργασία παρουσιάζει τη μελέτη προσομοίωσης της καταλυτικής αναγωγής οξειδίου του αζώτου. Η ανάλυση δείχνει την επίδραση της θερμοκρασίας στις εκπομπές των NOx & CO & C3H6. Μονολιθικοί τριοδικοί καταλύτες εφαρμόζονται για τη μείωση των εκπομπών κινητήρων καύσης. Ο σχεδιασμός του καταλυτικού μετατροπέα είναι μια πολύπλοκη διαδικασία που περιλαμβάνει τη βελτιστοποίηση διαφορετικών φυσικών και χημικών παραμέτρων. Η αριθμητική

προσομοίωση μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως αποτελεσματικό εργαλείο για τη διερεύνηση των καταλυτικών ιδιοτήτων ενός καταλυτικού μετατροπέα και για πρόβλεψη της απόδοσης του καταλύτη. Για την επίτευξη αυτού του στόχου, μια διδιάστατη περιγραφή πεδίου ροής συνδυάστηκε με ένα λεπτομερές μοντέλο επιφανειακής αντίδρασης. Αυτός ο μηχανισμός επιφανειακής αντίδρασης (με το C₃H₆ να ληφθεί ως αντιπροσωπευτικός των άκαυστων υδρογονανθράκων) αναπτύχθηκε χρησιμοποιώντας υπο-μηχανισμούς που αναπτύχθηκαν πρόσφατα για υδρογόνο, μονοξείδιο του άνθρακα και οξείδωση μεθανίου, τιμές βιβλιογραφίας για C₃H₆ οξείδωση και εκτιμήσεις για τις υπόλοιπες άγνωστες αντιδράσεις. Η δεδομένη CFD ανάλυση βασίζεται στην αλλαγή της αναλογίας πολύτιμων μετάλλων (Pt / Rh) και παρατήρησε την επίδραση στην εκπομπή ρύπων σε σχέση με τη θερμοκρασία.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

3. Μεθοδολογική Προσέγγιση

3.1 Περιγραφή λογισμικού CAD

Ο σχεδιασμός με τη βοήθεια υπολογιστή (CAD) είναι η χρήση υπολογιστών (ή σταθμών εργασίας) για τη δημιουργία, την τροποποίηση, την ανάλυση ή τη βελτιστοποίηση ενός σχεδίου. Το λογισμικό CAD χρησιμοποιείται για την αύξηση της παραγωγικότητας του σχεδιαστή, τη βελτίωση της ποιότητας του σχεδιασμού, τη βελτίωση της επικοινωνίας με τη βοήθεια των σχεδίων και εγχειριδίων και τη δημιουργία μιας βάσης δεδομένων που αφορούν τις κατασκευές. Τα σχέδια CAD συχνά έχουν τη μορφή ηλεκτρονικών αρχείων προς εκτύπωση, μηχανική κατεργασία ή άλλες κατασκευαστικές ενέργειες. Χρησιμοποιείται επίσης και ο όρος CADD.

Η χρήση του στο σχεδιασμό ηλεκτρονικών συστημάτων είναι γνωστή ως αυτοματισμός ηλεκτρονικής σχεδίασης (EDA). Στο μηχανολογικό σχεδιασμό είναι γνωστό ως μηχανική σχεδίαση αυτοματισμού (MDA) ή σχεδίαση με τη χρήση Η/Υ (CAD), η οποία περιλαμβάνει τη διαδικασία δημιουργίας τεχνικού σχεδίου με τη χρήση κατάλληλου λογισμικού υπολογιστή.

Το λογισμικό CAD για μηχανικό σχεδιασμό χρησιμοποιεί είτε γραφικά που βασίζονται σε διανύσματα για την απεικόνιση των αντικειμένων της παραδοσιακής σχεδίασης, ή μπορεί επίσης να παράγει ράστερ γραφικά που δείχνουν τη συνολική εμφάνιση των σχεδιασμένων αντικειμένων. Ωστόσο, οι πληροφορίες που μπορούν να αποτυπωθούν σε ένα σχέδιο CAD είναι κάτι παραπάνω από απλά σχήματα. Όπως και στη χειροκίνητη σύνταξη τεχνικών και μηχανολογικών σχεδίων, τα αρχεία CAD μπορούν να μεταφέρουν πληροφορίες, όπως υλικά, διεργασίες, διαστάσεις και ανοχές, σύμφωνα με τις λειτουργίες της εκάστοτε εφαρμογής.

Το CAD μπορεί να χρησιμοποιηθεί για το σχεδιασμό καμπυλών και σχημάτων σε δισδιάστατο (2D) χώρο ή καμπύλες, επιφάνειες και στερεά σε τρισδιάστατο (3D) χώρο.

Το CAD είναι μια σημαντική βιομηχανική τέχνη που χρησιμοποιείται εκτενώς σε πολλές εφαρμογές, όπως την αυτοκινητοβιομηχανία, τη ναυπηγική και την αεροδιαστημική

βιομηχανία, το βιομηχανικό και αρχιτεκτονικό σχεδιασμό, την προσθετική και σε πολλές άλλες εφαρμογές. Το CAD χρησιμοποιείται επίσης ευρέως για την παραγωγή κινούμενων σχεδίων υπολογιστή για ειδικά εφέ σε ταινίες, διαφημίσεις και τεχνικά εγχειρίδια, που συχνά ονομάζονται δημιουργία ψηφιακού περιεχομένου DCC. Η σύγχρονη πανταχού παρουσία και ισχύς των υπολογιστών σημαίνει ότι ακόμη και τα πιο απλά αντικείμενα όπως συσκευασίες τροφίμων και καθαριστικών, είναι σχεδιασμένα χρησιμοποιώντας τεχνικές που δεν θα μπορούσαν να φανταστούν οι μηχανικοί της δεκαετίας του 1960. Λόγω της τεράστιας οικονομικής του σημασίας, το CAD αποτέλεσε σημαντική κινητήρια δύναμη για την έρευνα στην υπολογιστική γεωμετρία, τα γραφικά υπολογιστών (υλικό και λογισμικό) και τη διακριτή διαφορική γεωμετρία. Ο σχεδιασμός γεωμετρικών μοντέλων για σχήματα αντικειμένων, συγκεκριμένα, καλείται περιστασιακά γεωμετρικός σχεδιασμός με τη βοήθεια υπολογιστή (CAGD).

Ο σχεδιασμός με τη βοήθεια υπολογιστή είναι ένα από τα πολλά εργαλεία που χρησιμοποιούνται από μηχανικούς και σχεδιαστές παγκοσμίως με διάφορους τρόπους, ανάλογα με το επάγγελμα του χρήστη και τον τύπο του εν λόγω λογισμικού.

Το CAD αποτελεί ένα μέρος της συνολικής δραστηριότητας ανάπτυξης ψηφιακών προϊόντων (DPD) στο πλαίσιο των διαδικασιών διαχείρισης κύκλου ζωής προϊόντων (PLM) και χρησιμοποιείται μαζί με άλλα εργαλεία, τα οποία είναι είτε ενσωματωμένες μονάδες είτε αυτόνομα προϊόντα, όπως:

Μηχανική με τη βοήθεια υπολογιστή (CAE) και ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων (FEA, FEM)

Κατασκευή με τη βοήθεια ηλεκτρονικού υπολογιστή (CAM), συμπεριλαμβανομένων οδηγιών σε μηχανήματα αριθμητικού ελέγχου υπολογιστή (CNC)

Φωτορεαλιστική απόδοση και προσομοίωση κίνησης.

Διαχείριση εγγράφων και έλεγχος αναθεώρησης χρησιμοποιώντας διαχείριση δεδομένων προϊόντος (PDM)

Το CAD χρησιμοποιείται επίσης για την ακριβή δημιουργία προσομοιώσεων φωτογραφιών που απαιτούνται συχνά κατά την προετοιμασία αναφορών περιβαλλοντικών επιπτώσεων, στις οποίες σχέδια υλοποιημένα με τη βοήθεια

υπολογιστή όπως για παράδειγμα μελλοντικών κτηρίων προορίζονται να τοποθετηθούν σε φωτογραφίες υφιστάμενων περιβαλλόντων για να αντιπροσωπεύσουν εκ των προτέρων τη μελλοντική τους απεικόνιση. Η πιθανή απόφραξη του μήκους ορατότητας καθώς και οι μελέτες σκιών αναλύονται επίσης συχνά με τη χρήση CAD.

Το CAD έχει αποδειχθεί χρήσιμο και για τους μηχανικούς με τη χρήση τεσσάρων ιδιοτήτων που είναι το ιστορικό κατασκευής, τα χαρακτηριστικά, η παραμετροποίηση και οι περιοριστικοί παράγοντες για τη βελτιστοποίηση των συστημάτων. Το ιστορικό κατασκευής μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να ανατρέξουμε στα προσωπικά χαρακτηριστικά του μοντέλου και να δουλέψουμε σε συγκεκριμένο χώρο παρά σε ολόκληρο το μοντέλο. Οι παράμετροι και οι περιορισμοί μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον προσδιορισμό του μεγέθους, του σχήματος και άλλων ιδιοτήτων των διαφόρων στοιχείων μοντελοποίησης. Τα χαρακτηριστικά του συστήματος CAD μπορούν να χρησιμοποιηθούν για ποικίλα εργαλεία μέτρησης όπως η αντοχή εφελκυσμού, αντοχή σε λυγισμό, ηλεκτρικές ή ηλεκτρομαγνητικές ιδιότητες κ.λπ. Επίσης, οι τάσεις, οι πιέσεις, η χρονική κλίμακα ή ο τρόπος με τον οποίο συμπεριφέρεται το στοιχείο σε ορισμένες θερμοκρασίες ("Computer-aided design", 2021)⁷.

3.2 Περιγραφή πεπερασμένων στοιχείων (FEM/FEA)

Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων (FEM/FEA) είναι μια αριθμητική μέθοδος (δηλαδή μέθοδος υπολογισμού με χρήση Η/Υ) για τον υπολογισμό προσεγγιστικών λύσεων μερικών διαφορικών εξισώσεων.

Η αναλυτική επίλυση των εξισώσεων που περιγράφονται τα διάφορα τεχνικά προβλήματα είναι δυνατή μόνο σε ειδικές περιπτώσεις, όπου οι καταπονήσεις και τα γεωμετρικά σχήματα είναι πάρα πολύ απλά. Όμως, λόγω αυξημένης ανάγκης επίλυσης και πιο σύνθετων προβλημάτων αναπτύχθηκαν επιπρόσθετα διάφορες προσεγγιστικές μέθοδοι.

Μία τέτοια μέθοδο αποτελεί και η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων. Αυτή η μέθοδος παρόλο που είναι προσεγγιστική, μπορεί να δώσει αξιόπιστα αποτελέσματα, έχοντας επίσης το πλεονέκτημα ότι μπορεί να εφαρμοστεί σε όλα τα προβλήματα. Το κύριο μειονέκτημά της είναι οι αυξημένες απαιτήσεις σε υπολογιστική ισχύ, ιδίως όταν αυτό εφαρμόζεται σε σύνθετα μοντέλα. Το μειονέκτημα όμως αυτό ξεπεράστηκε τα τελευταία χρόνια χάρη στη ραγδαία ανάπτυξη στην απόδοση των υπολογιστών. Η επιτυχία αυτής

της μεθόδου ήταν τόσο μεγάλη, που ακόμα και σήμερα χρησιμοποιείται στην έρευνα και στην βιομηχανία για τον υπολογισμό και τη μελέτη ποικίλων κατασκευών.

Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων είναι μία εξέλιξη των μητρωϊκών μεθόδων αριθμητικής επίλυσης διαφορικών εξισώσεων και έγινε από διάφορους σπουδαίους επιστήμονες όπως ο Ρέι Κλαφ, ο Ιωάννης Αργύρης, ο Μπόρις Γκαλέρκιν, ο Βάλτερ Ριτζ, και άλλοι.

Για να εφαρμοστεί η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων απαιτούνται τα εξής στάδια:

1. Εισάγεται η γεωμετρία της κατασκευής που υλοποιήθηκε σε ένα πρόγραμμα CAD και αναγνωρίζεται το τρισδιάστατο μοντέλο.
2. Χωρίζεται το μοντέλο σε πεπερασμένα στοιχεία και αφού ετοιμαστεί το πλέγμα επιλέγεται το είδος της επίλυσης και εισάγονται τα επιπλέον δεδομένα που απαιτούνται. Παραδείγματος χάριν, αν επιλεγεί να λυθεί το μοντέλο σε στατική καταπόνηση θα πρέπει να δοθούν τα δεδομένα για τις δυνάμεις και τις στηρίξεις. Αυτή η διαδικασία αποκαλείται *pre processing*.
3. Όταν ετοιμαστούν τα δεδομένα προς επίλυση, εισάγονται σε ένα πρόγραμμα το οποίο θα κάνει την επίλυση του προβλήματος. Τέτοιου είδους προγράμματα λέγονται *solver* και χρησιμοποιούν για τις επιλύσεις αριθμητικές μεθόδους.
4. Όταν τελειώσει η επίλυση τα αποτελέσματα πρέπει να χρησιμοποιηθεί ένα εργαλείο, που αποκαλείται *post processing*, για να μπορέσει ο μελετητής να δει και να ερμηνεύσει τα αποτελέσματα ("Μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων", 2021)⁸.

3.3 Περιγραφή προγράμματος Solidworks (CAD)

Το Solidworks είναι ένα πρόγραμμα *solid modeling computer-aided design (CAD)* και *computer aided engineering (CAE)* που "τρέχει" σε Microsoft Windows. Το SolidWorks έχει εκδοθεί από την εταιρεία Dassault Systèmes. Η Dassault Systèmes SOLIDWORKS Corp. δίνει στη διάθεση του χρήστη ένα μεγάλο φάσμα από 3D εργαλεία λογισμικού που δίνουν την δυνατότητα προσομοίωσης, δημιουργίας, διαχείρισης δεδομένων και δημοσίευσης. Τα προϊόντα Solidworks είναι σχετικά εύκολα στην εκμάθηση, χρήση και σχεδίαση.

Το SolidWorks είναι ένα solid modeler (μοντελοποιητής) που χρησιμοποιεί μια παραμετρική, βασισμένη στα χαρακτηριστικά προσέγγιση για τη δημιουργία μοντέλων. Το λογισμικό είναι γραμμένο σε Parasolid-πυρήνα.

Οι παράμετροι αναφέρονται σε περιορισμούς των οποίων οι τιμές καθορίζουν τη γεωμετρία ή το σχήμα του μοντέλου. Οι παράμετροι μπορούν να είναι είτε γεωμετρικές όπως εφαπτόμενες, παράλληλες, ομόκεντρες, οριζόντιες ή κατακόρυφες είτε αριθμητικές, όπως μήκος γραμμής ή διάμετρος κύκλου ή κλπ. Οι αριθμητικές παράμετροι μέσω της χρήσης σχέσεων, μπορούν να συνδέονται μεταξύ τους ώστε να “αιχμαλωτίσουν” την σχεδιαστική πρόθεση.

Η σχεδιαστική πρόθεση καθορίζεται από το πως ο δημιουργός θέλει το τμήμα ή το αντικείμενο να ανταποκριθεί στις τροποποιήσεις και τις ενημερώσεις. Τα χαρακτηριστικά αναφέρονται στα δομικά στοιχεία του αντικειμένου ή τμήματος αυτού. Αυτά είναι οι λειτουργίες και οι μορφές που απαρτίζουν το τμήμα. Τα σχέδια βασίζονται αρχικώς σε τυπικά 2D ή 3D σκίτσα σχημάτων όπως εξέχων όγκος, οπές, σχισμές, κλπ. Αυτά τα σχήματα στην συνέχεια εξωθούνται (extrude) ή αφαιρούνται (extruded cut) για να προστεθεί ή να αφαιρεθεί αντιστοίχως υλικό από το τμήμα. Τα χαρακτηριστικά που βασίζονται στις λειτουργίες και δεν είναι βασισμένα σε κάποιο αρχικό σκίτσο, περιλαμβάνουν χαρακτηριστικά όπως fillets, chamfers, shells τα οποία εφαρμόζονται στην όψη ενός τμήματος.

Το Solidworks είναι ένα αρκετά διαδεδομένο πρόγραμμα, σχετικά εύκολο στη χρήση, πράγμα που σημαίνει ότι υπάρχουν περισσότερες διαθέσιμες επιλογές. Αναλυτικότερα, παρακάτω θα αναφερθούν κάποια από τα πλεονεκτήματα του συγκεκριμένου προγράμματος:

ΠΑΡΑΓΩΓΙΚΟΤΗΤΑ: Εύχρηστες και διαισθητικές λύσεις 3D σχεδιασμού που διευκολύνουν την ανάπτυξη του προϊόντος και όχι στο χειρισμό του λογισμικού. Είναι δυνατή η δημιουργία λεπτομερών σχεδίων χωρίς σφάλματα. Οι αυτόματοι έλεγχοι εισχώρησης και ανίχνευσης σύγκρουσης εξασφαλίζουν πως όλα τα τεμάχια συνδέονται κατάλληλα μαζί μειώνοντας έτσι το συνολικό κύκλο σχεδιασμού.

ΔΥΝΑΜΗ: Δημιουργία λεπτομερών 2D σχεδίων που μπορούν να ενημερωθούν αυτόματα "on-the-fly" κατά την αλλαγή ενός 3D μοντέλου. Το λογισμικό Solidworks ενημερώνει τις

διαστάσεις, τους πίνακες καθώς και τις σημειώσεις με τις νέες τιμές με ακρίβεια. Ενημερώνει επίσης τις λίστες των υλικών, ώστε να μην υπάρχει σύγχυση στην κατασκευή. Επίσης υπάρχει η δυνατότητα δοκιμής του σχεδίου σε πραγματικές συνθήκες.

ΚΟΙΝΟΤΗΤΑ: Μια ενεργή, αυξανόμενη κοινότητα χρηστών SOLIDWORKS αναπτύσσει το ενδιαφέρον και τις γνώσεις πάνω στο σχεδιασμό. Άρα είναι πιο άμεσες οι βελτιώσεις στο λογισμικό λόγω του feedback που δίνουν οι χρήστες.

3.4 Περιγραφή προγράμματος ANSYS (FEA)

Τα λογισμικά πεπερασμένων στοιχείων ANSYS CFD (ANSYS Fluent και ANSYS CFX) πολυφασικές περιοχές, με ή χωρίς αλλαγή φάσης, αλλά και μετάδοση θερμότητας, διαθέτουν χρήσιμα εργαλεία για ακριβής προσομοίωση της πολύπλοκης συμπεριφοράς των ρευστών και παρέχουν ασφαλείς πληροφορίες και δεδομένα για τις πραγματικές διεργασίες ή επιδόσεις του προϊόντος κατά το στάδιο του σχεδιασμού, της βελτιστοποίησης του προϊόντος, της παραγωγής του καθώς και της πραγματικής του λειτουργίας. Με το λογισμικό αυτό παρέχετε η δυνατότητα μοντελοποίησης με την κορυφαία ταχύτητα και μέγιστη δυνατή, των μόνιμων και χρονικά μεταβαλλόμενων ροών, οι οποίες μπορεί να διαθέτουν και περιστρεφόμενες/κινούμενες κατασκευές, χημικές αντιδράσεις και άλλα σύνθετα φαινόμενα που χαρακτηρίζουν τον πραγματικό κόσμο.

Τα λογισμικά ANSYS CFD τρέχουν στην πλατφόρμα προσομοίωσης ANSYS Workbench και εκμεταλλεύονται τα προηγμένα εργαλεία προεπεξεργασίας για επεξεργασία της κύριας γεωμετρίας και πλεγματοποίησης, τις δυνατότητες προσαρμογής από τον χρήστη (user customization), την παραμετρικότητα της πλατφόρμας, την αυτόματη διαχείριση φακέλων και ροή εργασίας (workflow), όπως επίσης και την πλήρη σουίτα βελτιστοποίησης ANSYS DesignXplorer.

Γενικά για τα προγράμματα πεπερασμένων στοιχείων:

Για τη μοντελοποίηση μιας κατασκευής με πεπερασμένα στοιχεία είναι αναγκαίος ο διαχωρισμός των εργασιών σε διακεκριμένα στάδια. Αναλυτικότερα:

1ο Στάδιο → Κατασκευή της γεωμετρίας

2οΣτάδιο→Ορισμός των μηχανικών και φυσικών ιδιοτήτων των υλικών και επιλογή του είδους των πεπερασμένων στοιχείων

3οΣτάδιο→Διακριτοποίηση της γεωμετρίας σε πεπερασμένα στοιχεία και επιβολή των οριακών συνθηκών.

4οΣτάδιο→Επιλογή του τρόπου επίλυσης του προβλήματος (γραμμικό – μη γραμμικό – μεταβατικό – υπολογισμός ιδιοσυχνοτήτων κ.α.) και επίλυση.

5οΣτάδιο→Ανάγνωση και γραφική αναπαράστασή των αποτελεσμάτων.

Τα παραπάνω στάδια, υπάρχει δυνατότητα και ίσως κάποιες φορές αναγκαιότητα, να μην πραγματοποιηθούν όλα στο ίδιο λογισμικό.

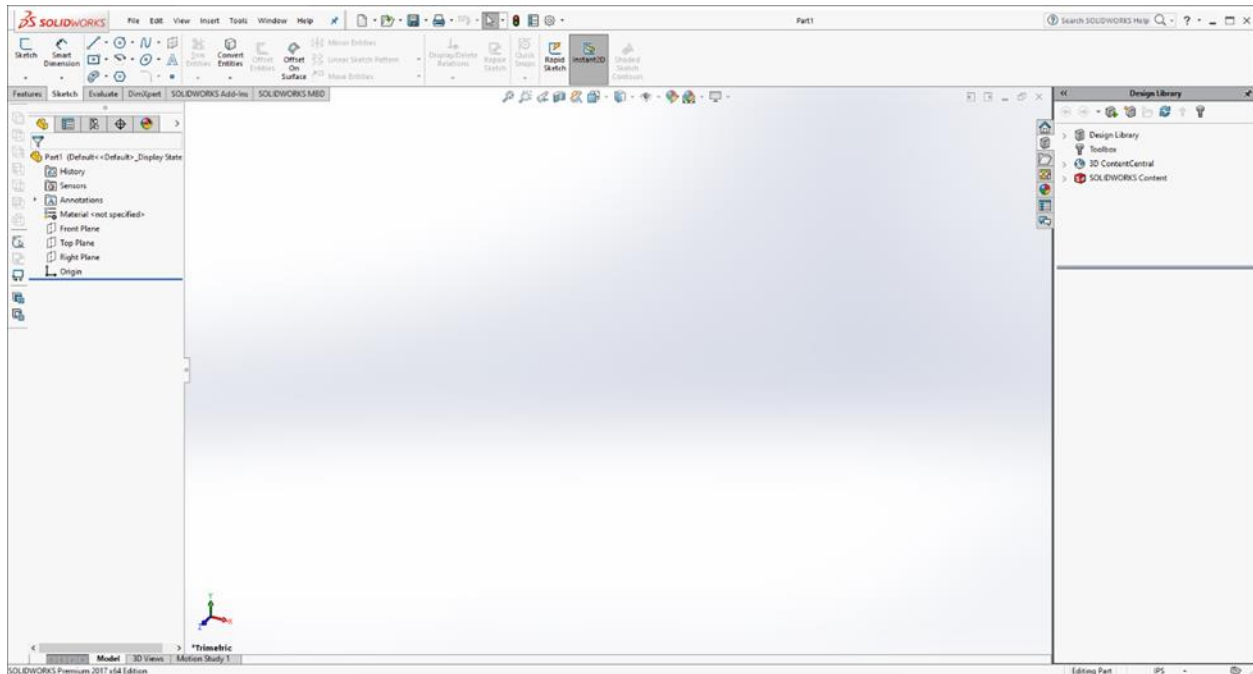
3.5 Εξοικείωση με το περιβάλλον SolidWorks - Σχεδίαση υποσυστήματος καταλύτη

Για την εξοικείωση με το περιβάλλον του προγράμματος SolidWorks ακολουθεί η περιγραφή σχεδίασης του κελύφους καθώς και του υποστρώματος (μεταλλικός ή κεραμικός μονόλιθος) ενός καταλύτη και τα βήματα που ακολουθήθηκαν για τον σχεδιασμό του. Το αντικείμενο που θα παρουσιαστεί στη συνέχεια, είναι η βασική διαδικασία κατασκευής των δύο προαναφερθέντων τμημάτων ενός τυπικού καταλυτικού μετατροπέα.

Ανοίγοντας το πρόγραμμα μεταβαίνουμε στο αρχικό παράθυρο το οποίο αποτελείται από δύο panels. Το πρώτο panel είναι για την γραφική αναπαράσταση του αντικειμένου και το δεύτερο για το Feature Manager.

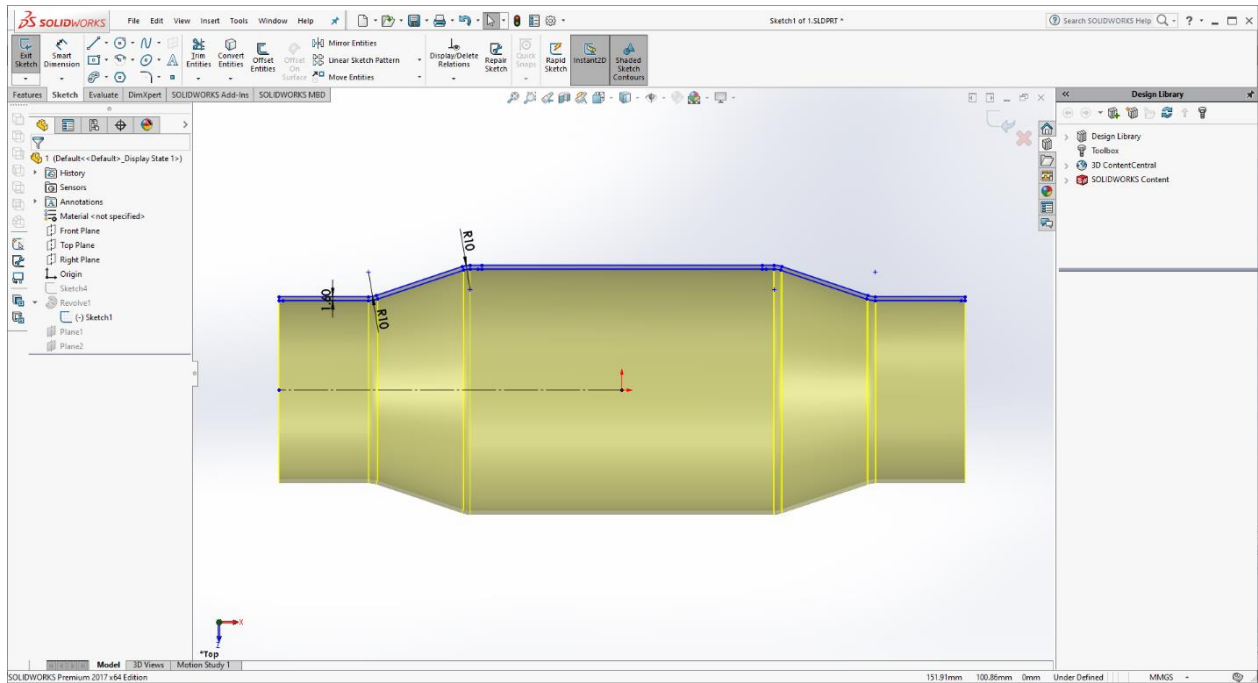
Για ευκολότερη και αποδοτικότερη χρήση του περιβάλλοντος Solidworks έχει προστεθεί ένα στιγμιότυπο αναφοράς των επιμέρους τμημάτων του παραθύρου σχεδίασης, τα οποία είναι τα εξής:

- Menu Bar
- Command Manager
- Heads-up View Toolbar
- Feature Manager Design Tree
- Reference Triad
- Status Bar
- Confirmation Corner with sketch indicator



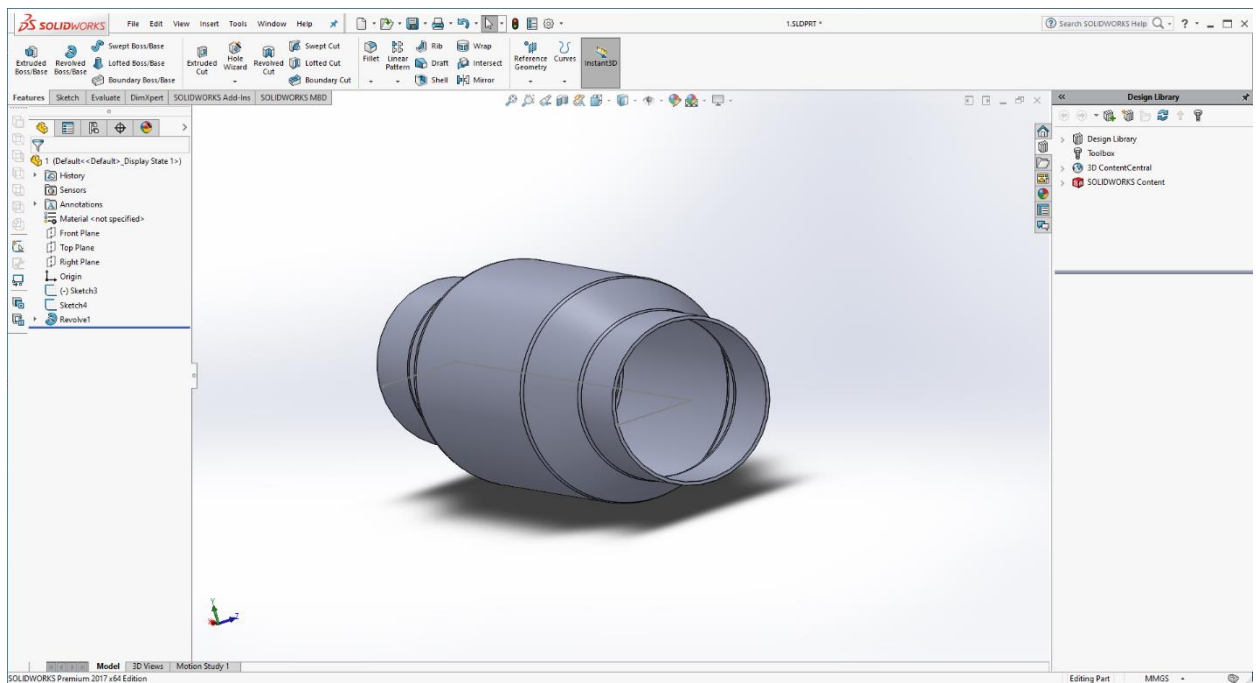
Εικόνα 9:Περιβάλλον εργασίας Solidworks

Στη συνέχεια, αφού επιλέχθηκε η κατασκευή ενός τεμαχίου “part”, σχεδιάστηκε το κάτωθι κομμάτι με γνώμονα το Front Plane και στη συνέχεια εφαρμόστηκε η εντολή περιστροφή (revolve boss/base) γύρω από τον άξονα συμμετρίας του αντικειμένου, που απεικονίζεται με διακεκομμένη γραμμή στην εικόνα που ακολουθεί.



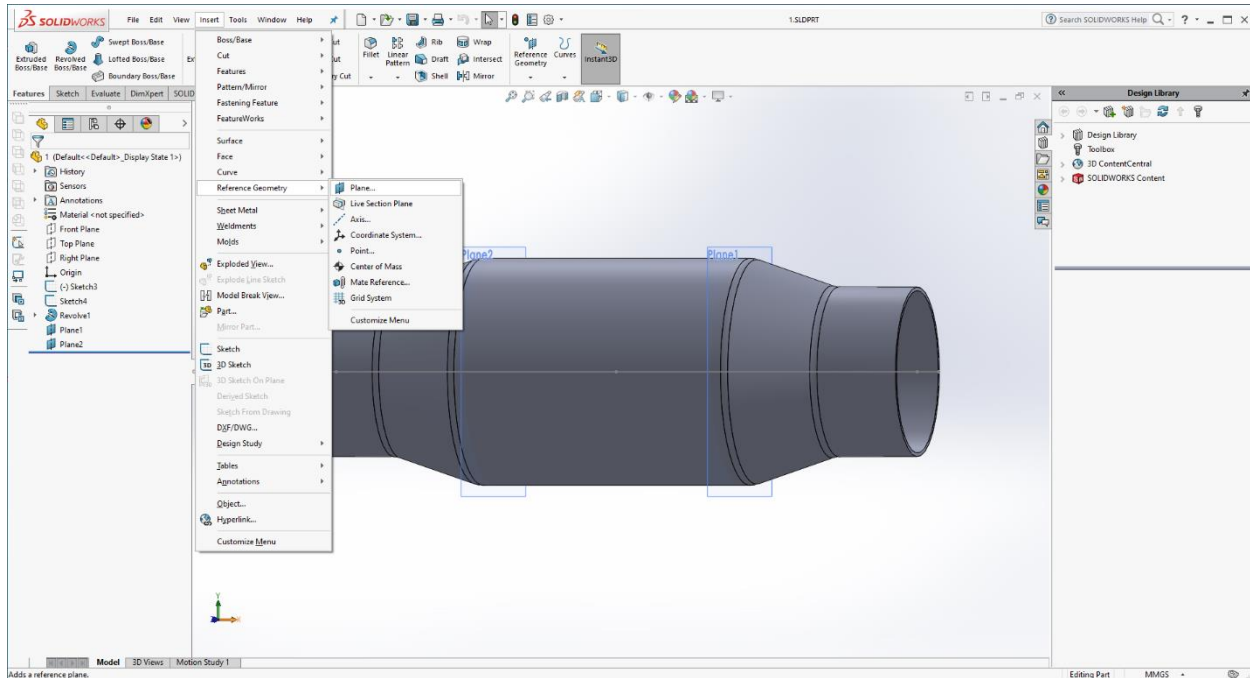
Εικόνα 10: Βασική δισδιάστατη κατασκευή καταλύτη

Έτσι, αποτυπώθηκε η τελική μορφή του κελύφους των προς σχεδίαση καταλυτών, στο οποίο εισήχθησαν τα υποστρώματα του εκάστοτε διαφορετικού καταλύτη που σχεδιάστηκαν.



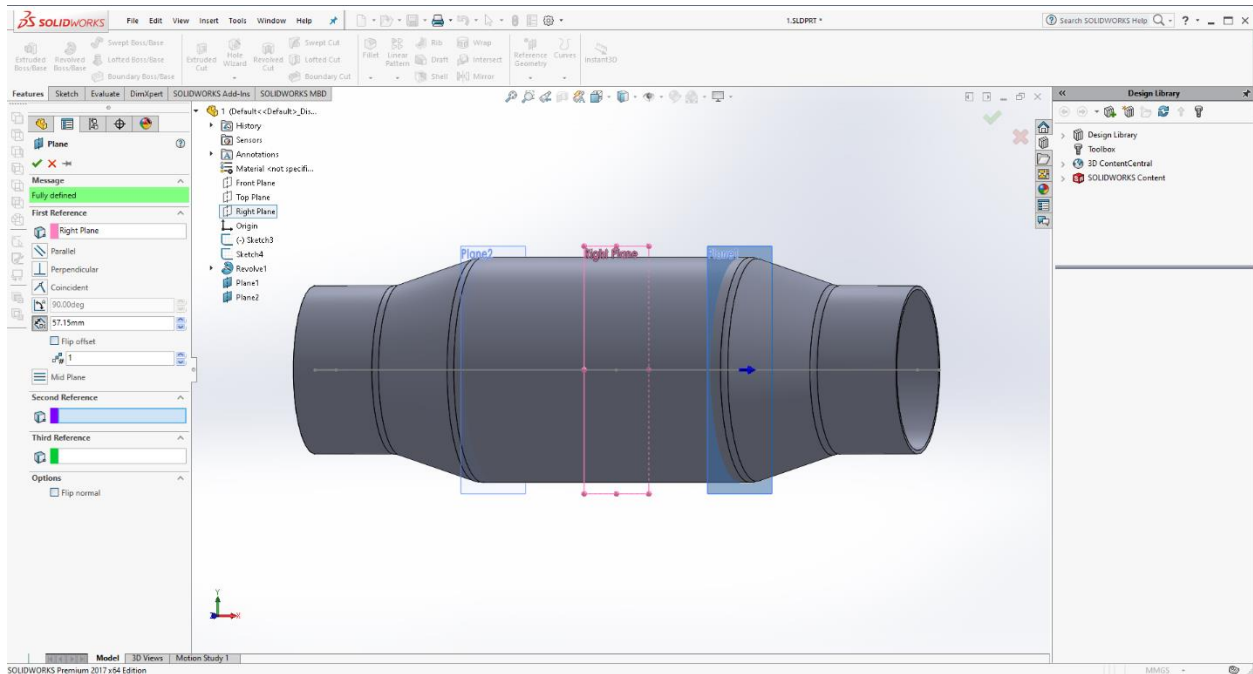
Εικόνα 11: Τελική τρισδιάστατη γεωμετρία καταλύτη μετά την εντολή περιστροφής revolve

Στη συνέχεια επιλέχθηκε το Insert, Reference Geometry και Plane, καθώς αυτές οι επιλογές θα επιτρέψουν μελλοντικά την ένωση του κελύφους του καταλήτη με το εσωτερικό μονόλιθο.



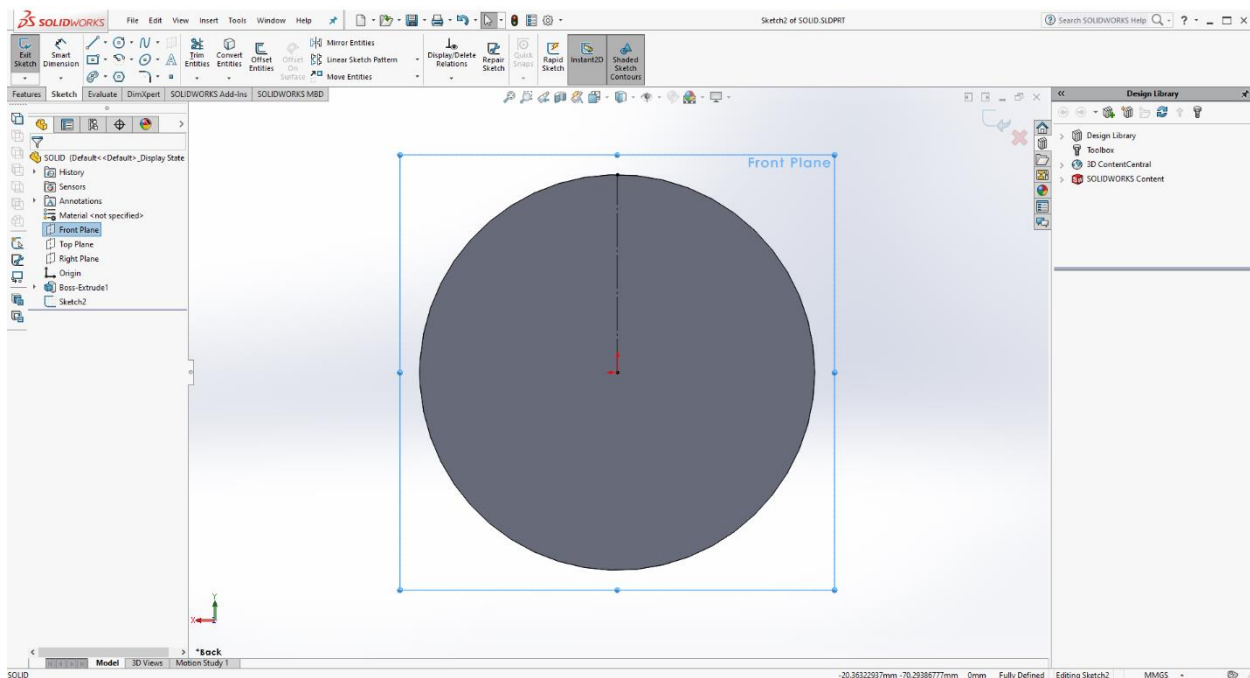
Εικόνα 12: Τρισδιάστατη απεικόνιση καταλήτη πριν τη δημιουργία νέων κατακόρυφων τομών

Στη συνέχεια, επιλέχθηκαν δύο όψεις, 57,15mm εκατέρωθεν του κέντρου, καθώς αυτό θα δώσει το σωστό και αναγκαίο κεντράρισμα του μονόλιθου εντός του κελύφους του καταλήτη.



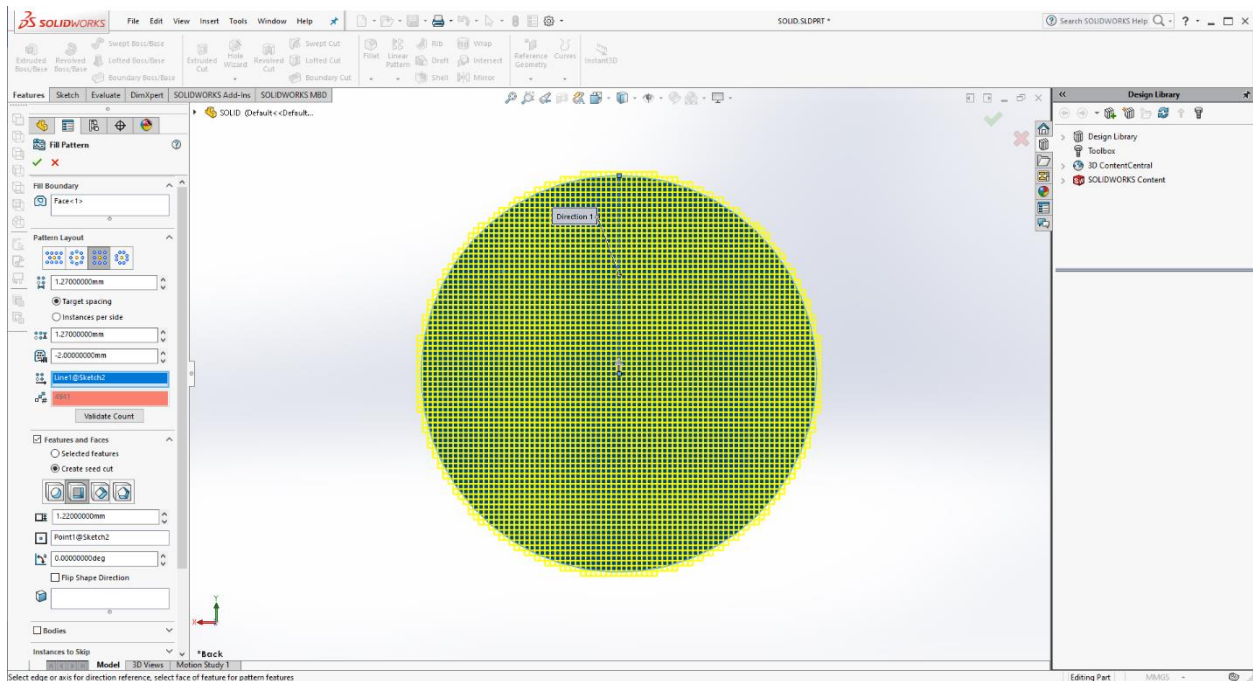
Εικόνα 13: Τρισδιάστατη απεικόνιση καταλύτη πριν τη δημιουργία νέων κατακόρυφων τομών

Το ίδιο μοτίβο σχεδίασης ακολουθήθηκε και στο υπόστρωμα του καταλύτη, δηλαδή, εν προκειμένω, το μεταλλικό μονόλιθο. Σχεδιάστηκε ένας κύκλος σε front plane με ακτίνα 49.2mm, καθώς ο καταλύτης, μετά τη διαστολή είναι 4 ιντσών με εξωτερικά τοιχώματα πάχους 1.6mm. Μετά τη σχεδίαση του κύκλου, χρησιμοποιήθηκε η εντολή εξώθησης (extrude) για μήκος 114.3mm ή 4.5 ίντσες.



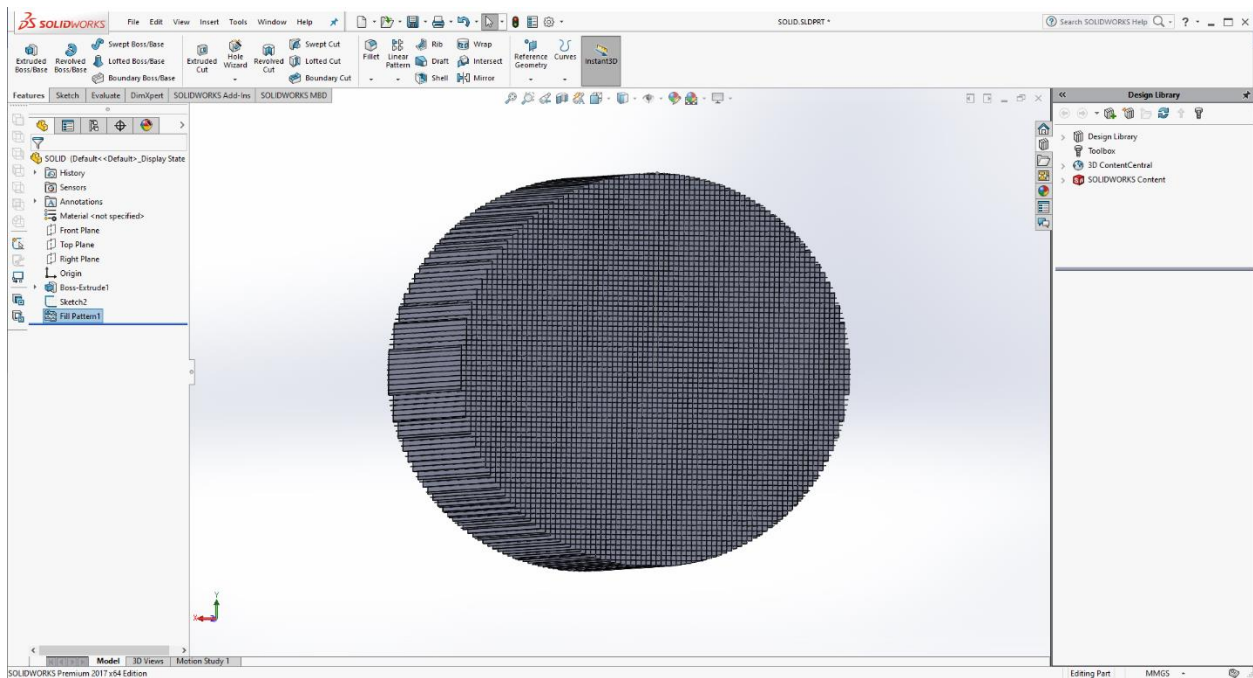
Εικόνα 14: Συμπαγής κύλινδρος διαμέτρου 49,2mm

Μετά, μέσω του Features πάνελ, επιλέχθηκε το εικονίδιο linear pattern και στη συνέχεια η επιλογή Fill pattern. Έπειτα, στην επιλογή fill boundary εισήχθη η όψη στην οποία εφαρμόστηκε η τροποποίηση αυτή και ακολούθως η κάθετη και οριζόντια απόσταση των κυψελών μεταξύ τους καθώς και η απόσταση κατά την οποία οι κυψέλες θα ξεπεράσουν τα όρια της ακτίνας του συμπαγούς κυλίνδρου. Θα πρέπει επίσης να οριστεί η κατεύθυνση των κυψελών, η οποία εμφανίζεται με μαύρη διακεκομμένη γραμμή. Και στη συνέχεια ορίστηκε το μέγεθος των ίδιων των κυψελών, το κέντρο από το οποίο θα ξεκινήσει η αποτύπωση καθώς και το σχήμα αυτών, όπως φαίνεται παρακάτω.



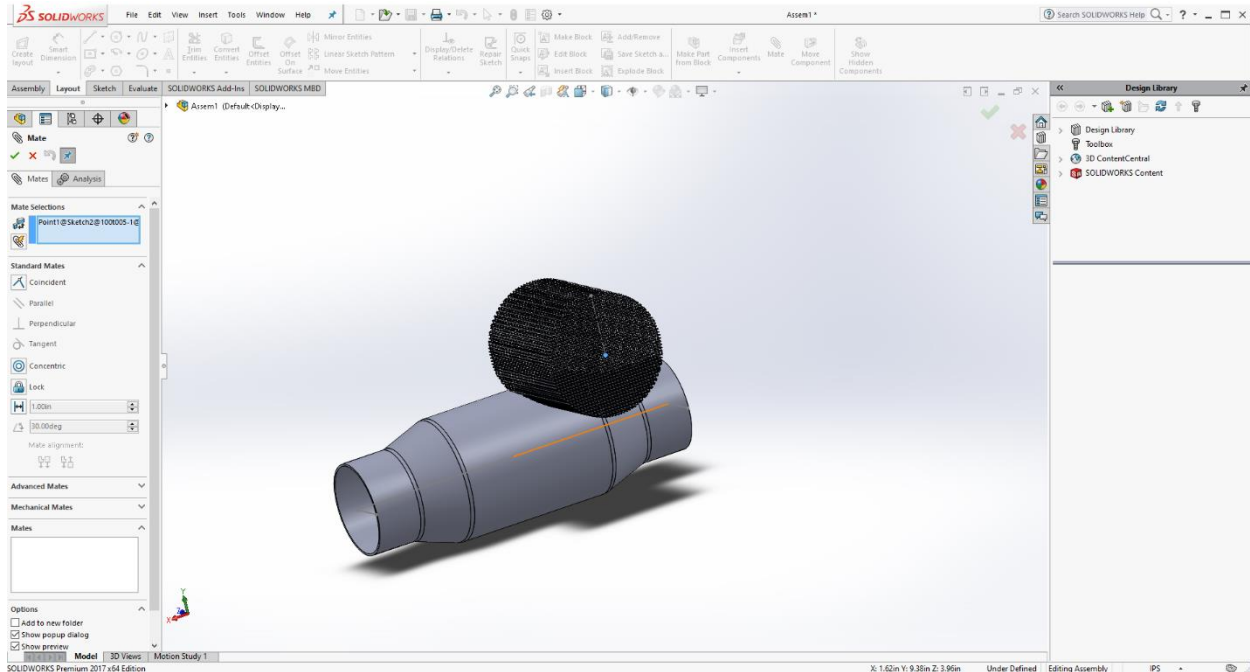
Εικόνα 15: Εφαρμογή του fill pattern για τη διάτρηση του συμπαγούς κυλίνδρου

Εκτελώντας την άνωθεν εντολή, αποτυπώθηκε με απόλυτη ακρίβεια, η κυψελώδης δομή του υποστρώματος τους εκάστοτε σχεδιασμένου καταλύτη.



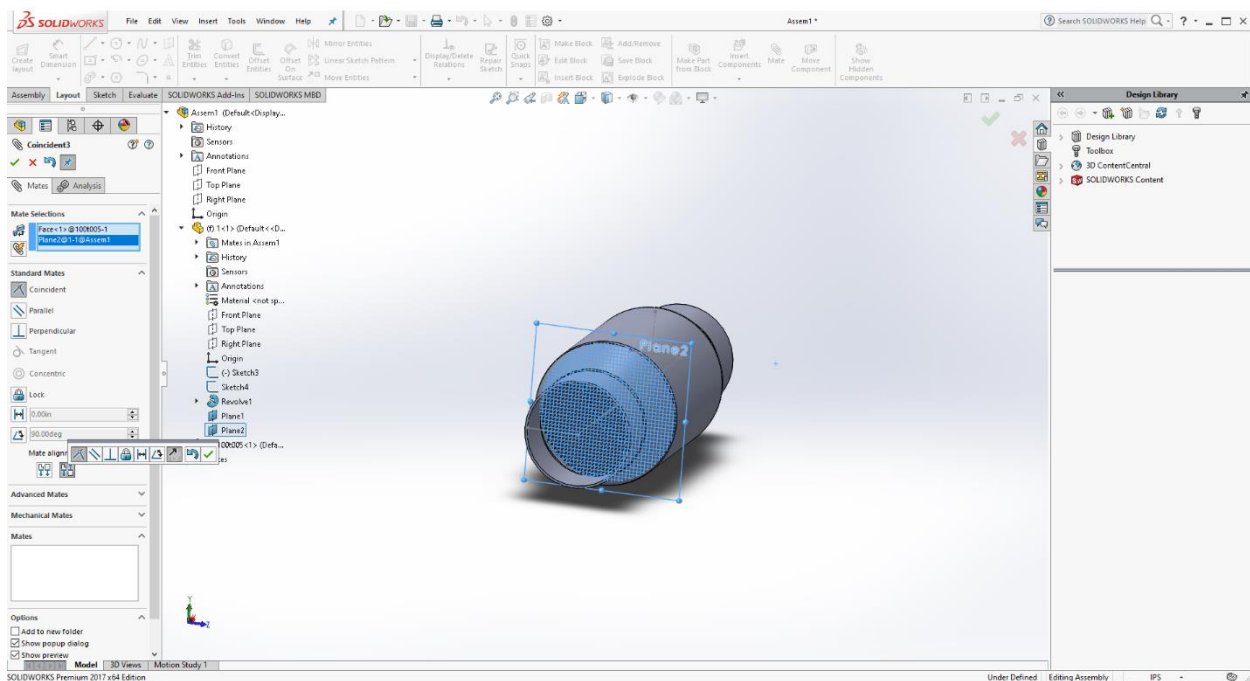
Εικόνα 16: Τελική απεικόνιση μετά τη διάτρηση

Στη συνέχεια, έγινε εκκίνηση του προγράμματος, αυτή τη φορά επιλέγοντας την επιλογή assembly αντί για part, εισάγοντας τα δύο σχέδια επιμέρους σχέδια που αναφέρθηκαν ανωτέρω. Αφού εισήχθησαν τα δύο επιμέρους σχέδια, τότε γίνεται το κατάλληλο mate, για να εφαρμόσουν σωστά αυτά τα δύο νέα υποσυστήματα, στη κατάλληλη τους θέση. Πρώτα, έγινε το κεντράρισμα του μονόλιθου, με τον άξονα συμμετρίας του κελύφους καταλύτη.



Εικόνα 17:Συναρμολόγηση υποστρώματος καταλύτη με κέλυφος

Στη συνέχεια έγινε το δεύτερο και τελευταίο mate των δύο υποσυστημάτων του καταλύτη, μεταξύ της μίας όψης του μονόλιθου, με ένα από τα δύο πλάνα των έκκεντρων τομών που δημιουργήθηκαν σε προηγούμενο στάδιο και έτσι πλέον δημιουργείται το τελικό σύνολο του καταλύτη.



Εικόνα 18: Τελική εικόνα υποσυστήματος μετά την ένωση υποστρώματος-κελύφους

Στα σχέδια 1 έως 15 που ακολουθούν στο παράρτημα Ι, παρουσιάζονται τα σχέδια των καταλυτών οι οποίοι επιλύονται μέσω ANSYS στο κεφάλαιο 4. Για τη μελέτη της επίδρασης των γεωμετρικών χαρακτηριστικών του καταλύτη, έχουν σχεδιαστεί καταλύτες με τρεις διαφορετικές πυκνότητες κυψελών (100CPSI, 200CPSI, 400CPSI) και για κάθε μία από αυτές έχει μεταβληθεί και το πάχος των εσωτερικών τοιχωμάτων του υποστρώματος καταλύτη. Συνολικά, έχουν σχεδιαστεί δεκαπέντε μοντέλα διαφορετικών καταλυτών σε πυκνότητα καθώς και πάχος τοιχωμάτων, όπως φαίνεται και στον ακόλουθο πίνακα. Η πυκνότητα των κυψελών εκφράζεται μέσω του μεγέθους CPSI (αριθμός κυψελών ανά τετραγωνική ίντσα) ή σε CPI (αριθμός κυψελών ανά ίντσα) το οποίο ουσιαστικά είναι η ρίζα του CPSI. Το κελί «Cell wall thickness»(WT) περιγράφει το πάχος των εσωτερικών τοιχωμάτων του καταλύτη, για το οποίο έχουν επιλεγεί 5 διαστάσεις: 0.05mm, 0.06mm, 0.08mm, 0.12mm και 0.16mm. Επίσης, περιγράφεται το μέγεθος κάθε κυψέλης καταλύτη στο κελί «Cell size in mm», λαμβάνοντας υπόψη κάθε φορά την πυκνότητα κυψελών και το πάχος καταλύτη $(25.4-CPI*WT)/CPI$. Τέλος, έχει καταγραφεί και η απόσταση από κέντρο σε κέντρο κάθε κυψέλης, προσθέτοντας απλά το «Cell size in mm» με το «Cell wall thickness».

	100CPSI				
Cells per square inch (CPSI):	100	100	100	100	100
Cells per inch length (CPI):	10	10	10	10	10
Cell Wall Thickness:	0,05	0,06	0,08	0,12	0,16
Inches in mm:	25,4	25,4	25,4	25,4	25,4
Cell size in mm:	2,49	2,48	2,46	2,42	2,38
Center to center cell distance:	2,54	2,54	2,54	2,54	2,54
	200CPSI				
Cells per square inch (CPSI):	200	200	200	200	200
Cells per inch length (CPI):	14,14	14,14	14,14	14,14	14,14
Cell Wall Thickness:	0,05	0,06	0,08	0,12	0,16
Inches in mm:	25,4	25,4	25,4	25,4	25,4
Cell size in mm:	1,75	1,74	1,72	1,68	1,64
Center to center cell distance:	1,80	1,80	1,80	1,80	1,80
	400CPSI				
Cells per square inch (CPSI):	400	400	400	400	400
Cells per inch length (CPI):	20	20	20	20	20
Cell Wall Thickness:	0,05	0,06	0,08	0,12	0,16
Inches in mm:	25,4	25,4	25,4	25,4	25,4
Cell size in mm:	1,22	1,21	1,19	1,15	1,11
Center to center cell distance:	1,27	1,27	1,27	1,27	1,27

Πίνακας 1:Γεωμετρικά χαρακτηριστικά Καταλυτών που έχουν σχεδιαστεί

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

4. Προσομοιώσεις με τη Βοήθεια του Ansys

Σκοπός της εργασίας αυτής είναι η προσομοίωση μοντέλου καταλυτικού μετατροπέα με σχεδιαστικές διαφορές βάσει πυκνότητας κυψελών καταλύτη (CPSI) καθώς και πάχος τοιχωμάτων υποστρώματος, συγκεκριμένα επιλέχθηκαν τρεις διαφορετικές πυκνότητες κυψελών (100, 200 και 400CPSI) καθώς και 5 διαφορετικά πάχη τοιχωμάτων υποστρώματος (0.05, 0.06, 0.08, 0.12, 0.16mm), σε σταθερές συνθήκες ταχύτητας και θερμοκρασίας καυσαερίων (22.6m/s & 933.15K).

Με τη χρήση του ANSYS Fluent θα προσομοιωθούν δεκαπέντε διαφορετικά μοντέλα με σενάριο ταχύτητας καυσαερίων 22.6 m/s για την μελέτη του φαινομένου αντίθλιψης που παρουσιάζεται σε τυπικούς καταλυτικούς μετατροπείς συναρτήσεως των γεωμετρικών χαρακτηριστικών αυτών.

4.1 Εισαγωγή στο ANSYS WORKBENCH 2020R2

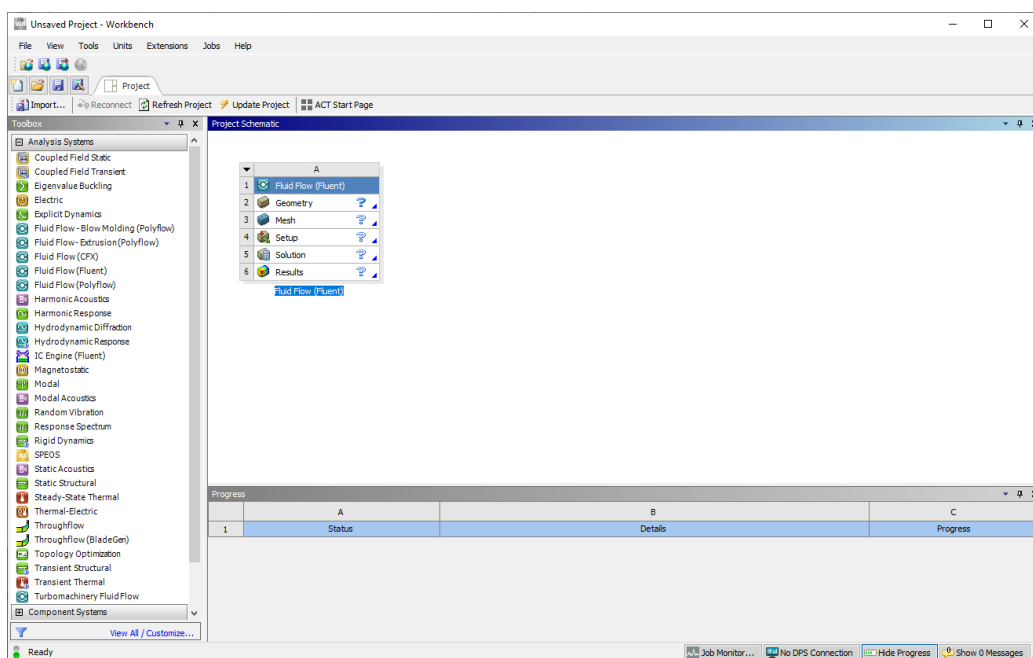
Το πακέτο λογισμικού ANSYS Workbench επιλέχθηκε καθώς προσφέρει δυνατότητα επίλυσης προβλημάτων ροής με χρήση πεπερασμένων στοιχείων.

Το πακέτο λογισμικού ANSYS WORKBENCH 2020R2 αποτελεί ένα ισχυρό σύστημα προσομοίωσης, το οποίο μπορεί να χρησιμοποιείται για ένα μεγάλο εύρος μοντέλων πολύπλοκης γεωμετρίας και για ένα μεγάλο σύνολο προσομοιώσεων που περιλαμβάνει μεταξύ άλλων:

- Γραμμική στατική και δυναμική φόρτιση.
- Ρευστομηχανική ανάλυση
- Εύρεση Ιδιοσυχνοτήτων
- Αρμονική ή τυχαία ταλάντωση
- Θερμική ανάλυση (υπολογισμός θερμικών τάσεων)
- Λυγισμός
- Αποκοπή υλικού (μεταλλικές κατεργασίες) και σύντομα γεγονότα (crash, drop)

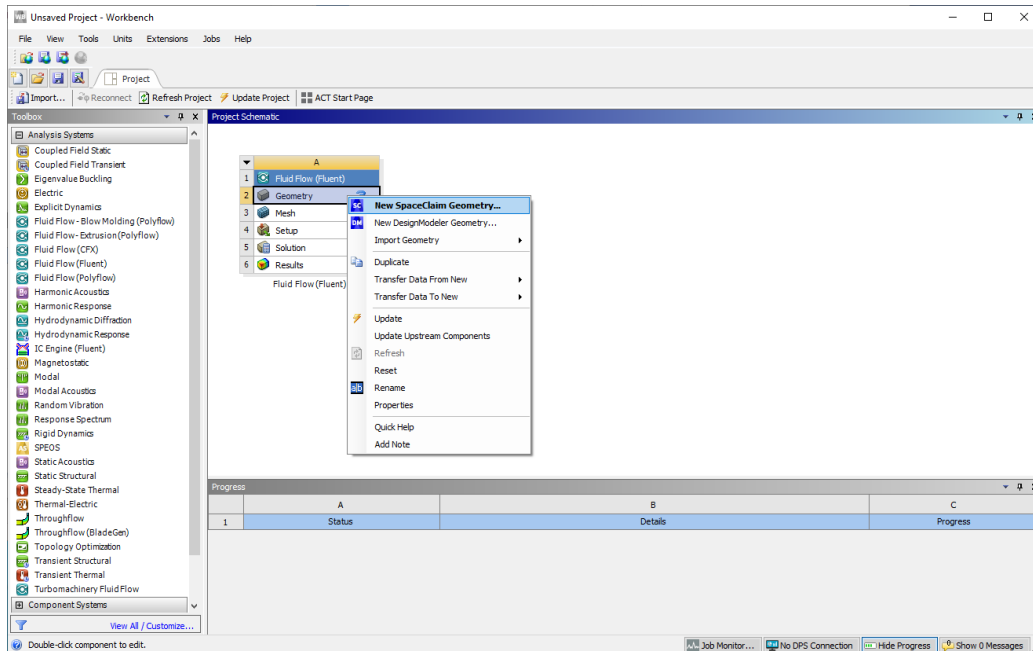
Η αυτόματη γεννήτρια Mesh (AMG) του ANSYS παράγει ένα βελτιστοποιημένο και αναλυτικότερο σύστημα πλέγματος στις περιοχές του μοντέλου όπου απαιτείται για την τρέχουσα διαδικασία ανάλυσης. Αυτό διευκολύνει τη βελτιωμένη ανάλυση του τεμαχίου, χωρίς να αυξάνει σημαντικά το μέγεθος του προβλήματος και των υπολογιστικών απαιτήσεων.

Αφού γίνει εκκίνηση του λογισμικού ANSYS Workbench, επιλέγεται από την εργαλειοθήκη το σύστημα ανάλυσης Fluid Flow (Fluent).



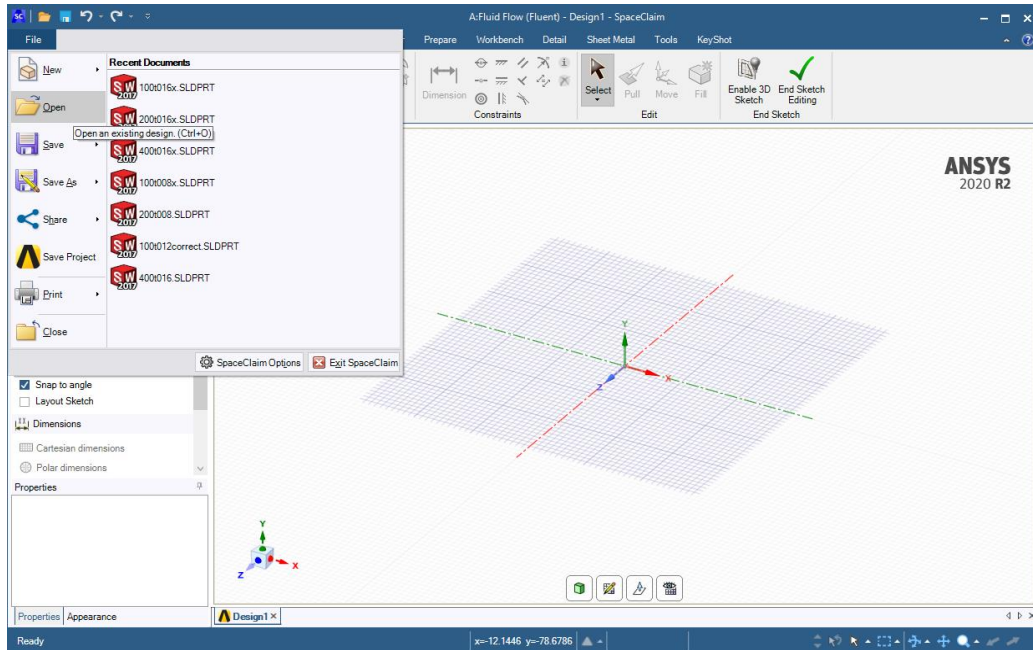
Εικόνα 19: Γενικό Περιβάλλον του Ansys Workbench & Ansys Fluent

Εφόσον γίνει εκκίνηση του Ansys Fluent, πατώντας την επιλογή Geometry, δίνεται η δυνατότητα εισαγωγής της γεωμετρίας μέσω του import geometry σε αρχεία τύπου Parasolid με κατάληψη (.x_t) είτε γίνεται εκκίνηση του λογισμικού SpaceClaim για την απευθείας εισαγωγή της γεωμετρίας των αρχείων του Solidworks με κατάληξη (.sldprt ή .sldasm).



Εικόνα 20: Εισαγωγή της γεωμετρίας του μοντέλου στο λογισμικό SpaceClaim

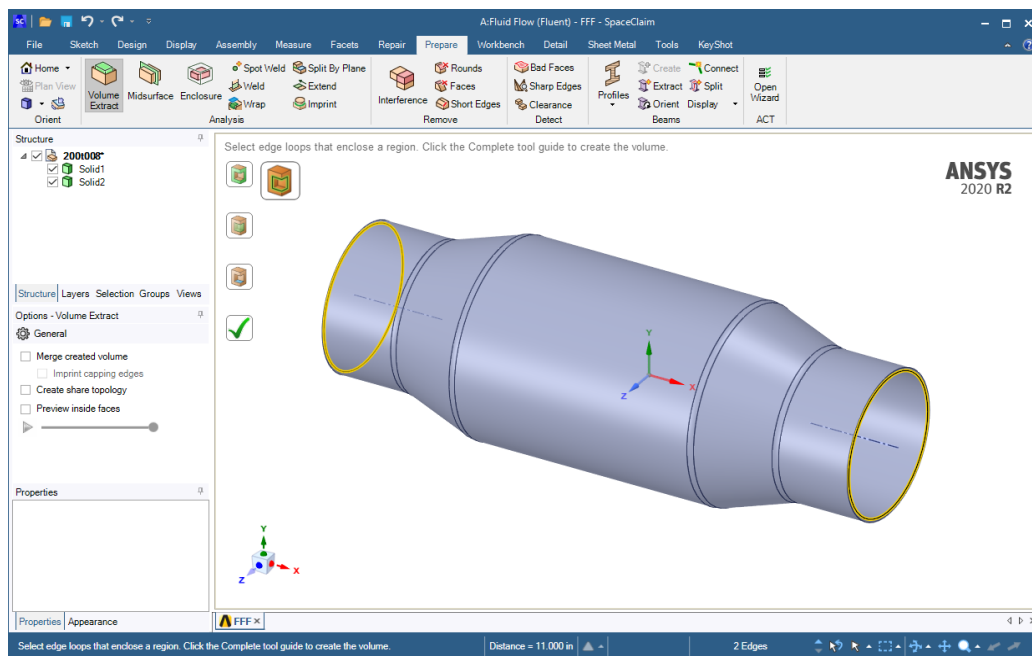
Έπειτα, από το κεντρικό μενού του SpaceClaim, επιλέχθηκε το File, Open και στην συνέχεια εισήχθη η προς μελέτη γεωμετρία του εκάστοτε τρισδιάστατου σχεδίου.



Εικόνα 21: Γενικό περιβάλλον SpaceClaim και εισαγωγή μοντέλου

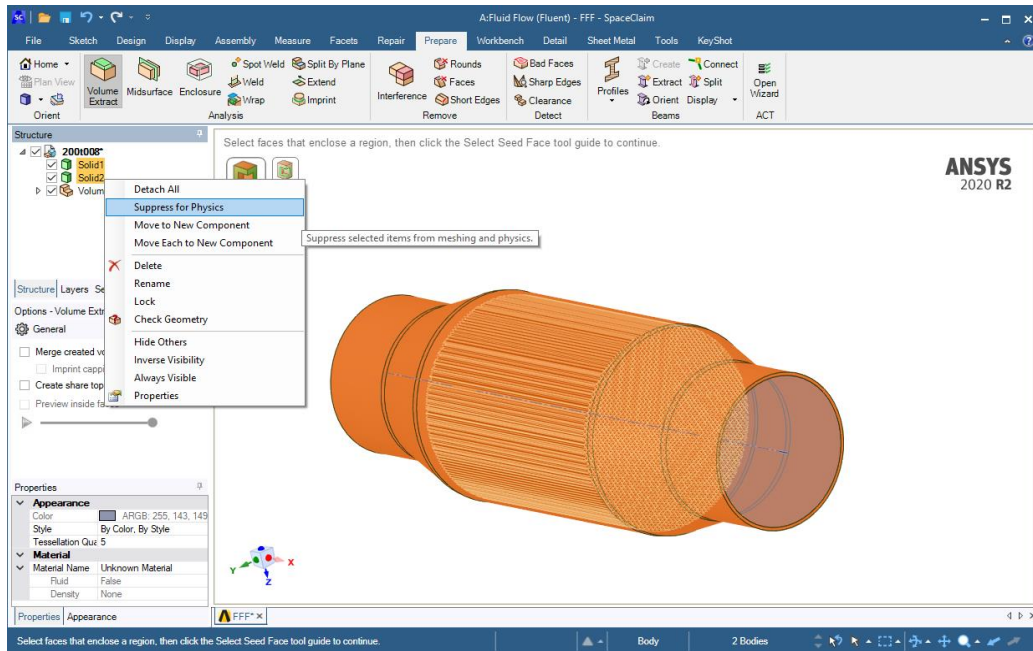
Μετά την επιτυχούς εισαγωγή της γεωμετρίας, θα πρέπει να καθοριστεί ο εσωτερικός όγκος του μοντέλου. Για αυτό το σκοπό, επιλέγεται το Prepare και στη συνέχεια το Volume

extract και επιλέγονται τα 2 στόμια του μοντέλου, που θα ορισθούν στη πορεία ως επιφάνειες εισόδου (inlet) ή εξόδου (outlet).



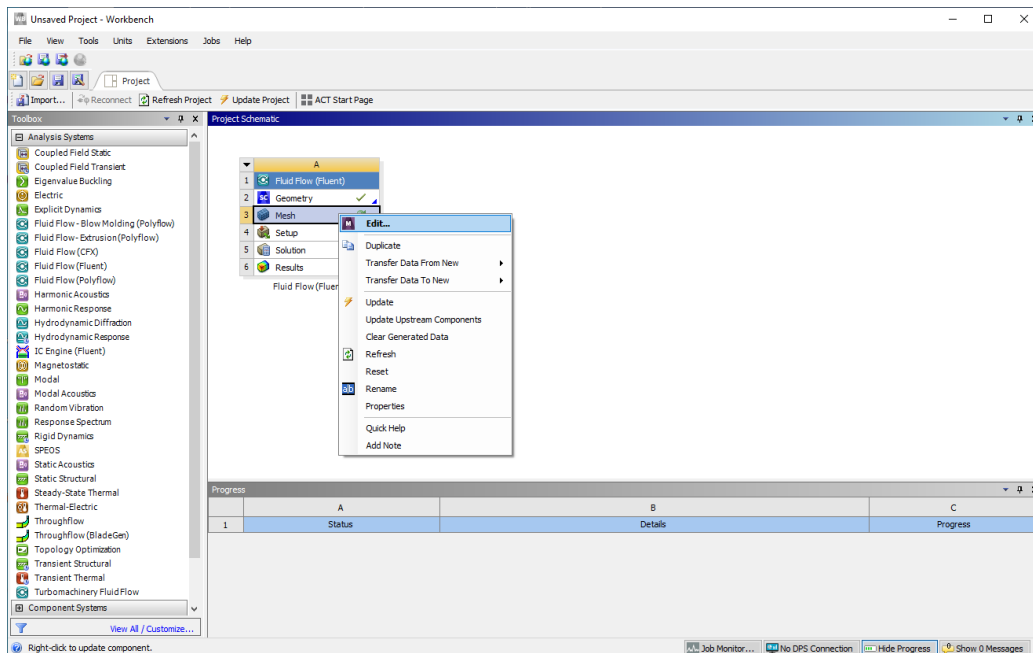
Εικόνα 22: Επιλογή εξαγωγής όγκου για τον ορισμό του εσωτερικού όγκου του μοντέλου

Μετά τον επιτυχή καθορισμό του εσωτερικού όγκου του μοντέλου, επιλέγονται τα δύο στερεά σώματα, ήτοι κελύφους και υποστρώματος καταλύτη και στη συνέχεια η επιλογή Suppress for physics και μπορεί πλέον το λογισμικό SpaceClaim να τερματιστεί.



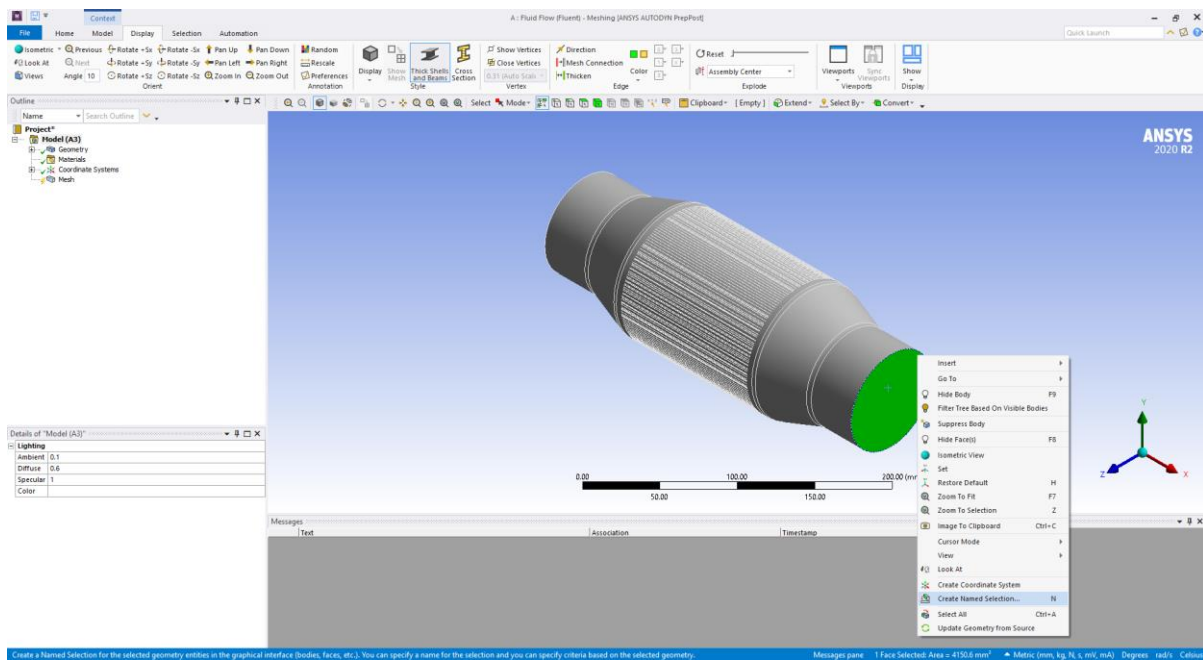
Εικόνα 23: Επιλογή «Suppress for physics» στα δύο στερεά σώματα του μοντέλου στο περιβάλλον SpaceClaim

Στη συνέχεια, επιλέγεται από το μενού του Fluent, Mesh και στη συνέχεια Edit για να γίνει η πλεγματοποίηση (Mesh) στον εσωτερικό όγκο του μοντέλου.



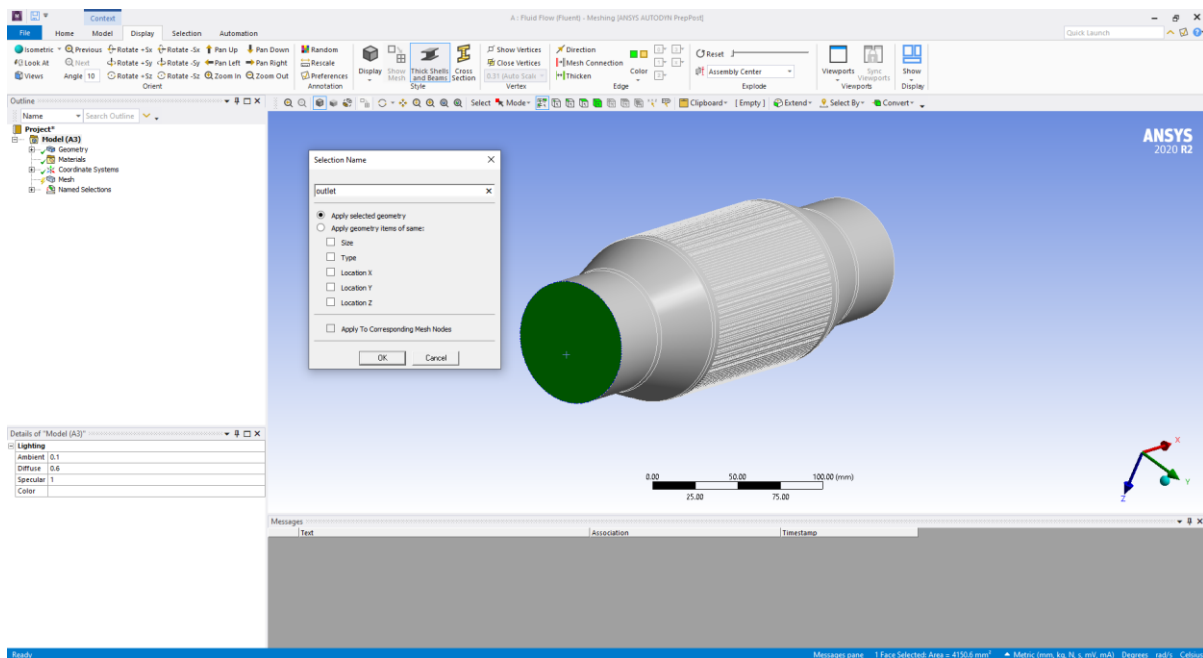
Εικόνα 24: Εκκίνηση λογισμικού πλεγματοποίησης στο Ansys Workbench

Μόλις ανοίξει το λογισμικό, επιλέγεται ένα από τα στόμια και έπειτα η επιλογή Create Named Selection, επιλέγοντας σαν όνομα το «inlet».



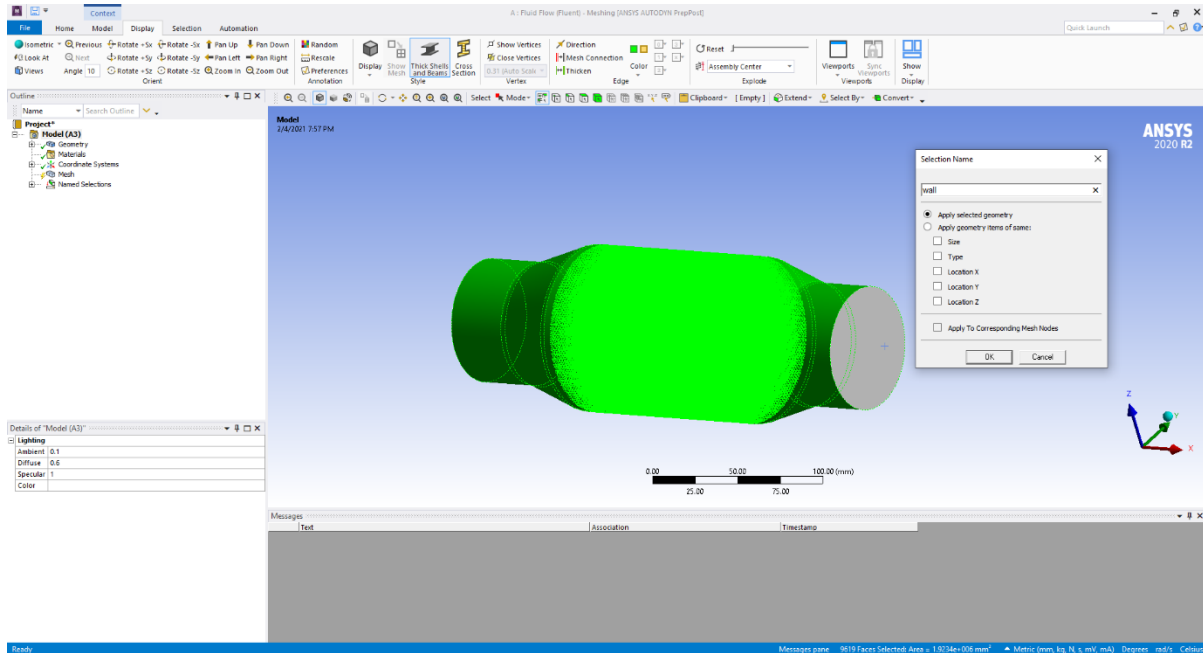
Εικόνα 25: Δημιουργία επιφάνειας εισόδου «inlet» των αερίων

Στη συνέχεια, επιλέγεται το στόμιο απέναντι, με τον ίδιο τρόπο που περιγράφηκε άνωθεν, αυτή τη φορά με όνομα «outlet».



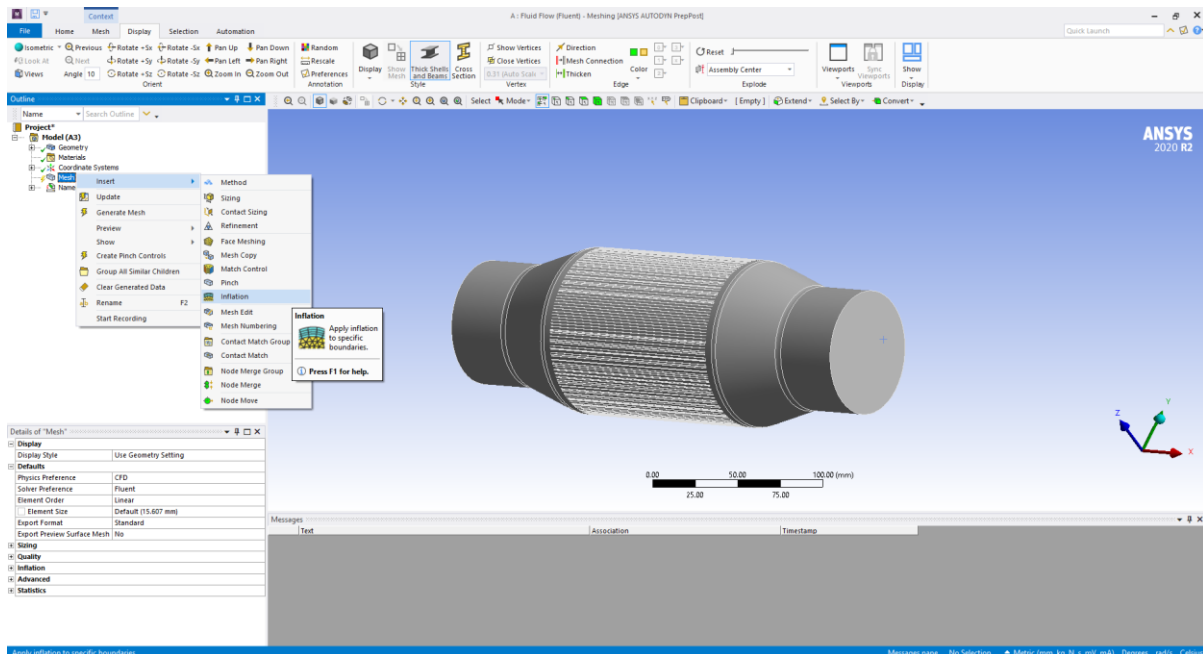
Εικόνα 26: Δημιουργία επιφάνειας εξόδου «outlet» των αερίων

Στη συνέχεια, επιλέγεται ολόκληρο το μοντέλο (με την επιλογή Ctrl+A) και έπειτα γίνεται απεπιλογή των δύο στομίων που ονομάστηκαν σαν «inlet» και «outlet», με τον ίδιο τρόπο που περιεγράφηκε και άνωθεν, αυτή τη φορά με όνομα «wall».



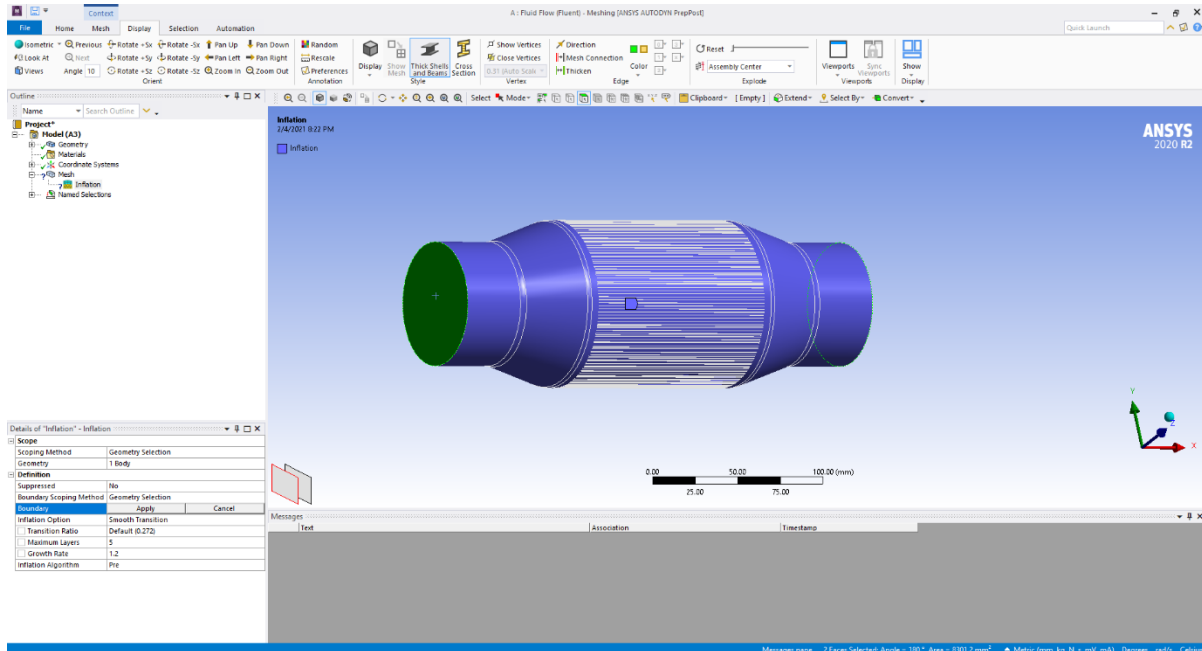
Εικόνα 27: Ορισμός επιφάνειας τοιχωμάτων υποστρώματος και κελύφους ως «wall»

Ακολουθώντας, στις επιλογές αριστερά, διαλέγεται το Mesh, το Insert και έπειτα το Inflation.



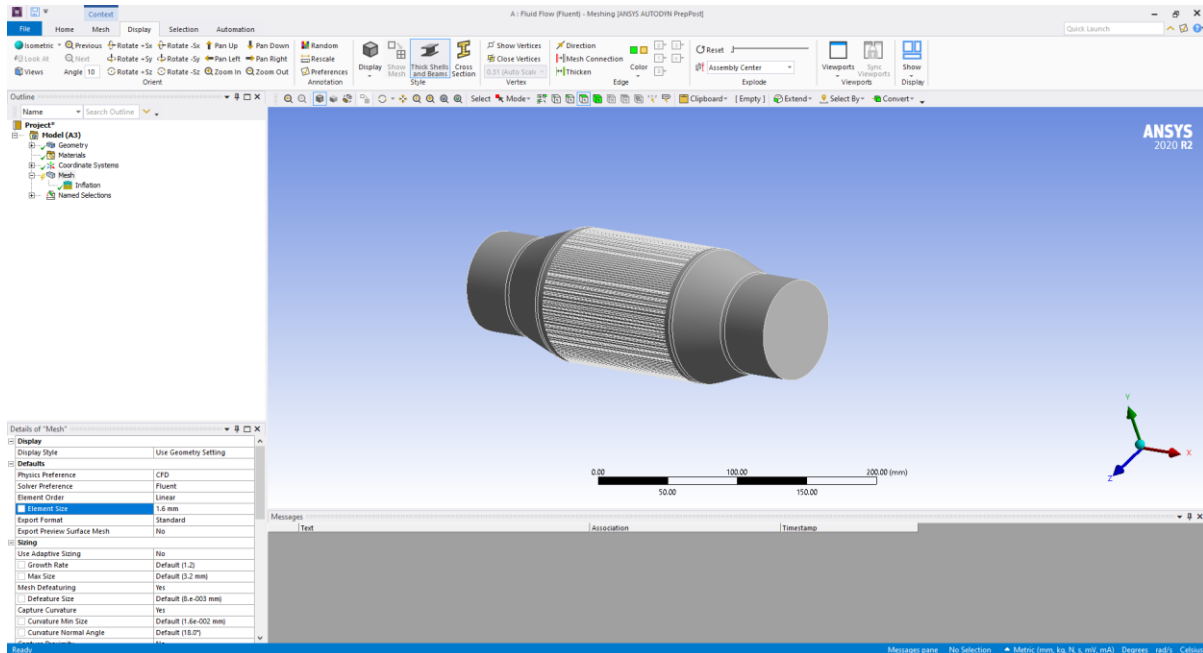
Εικόνα 28: Δημιουργία περιοχής inflation στο μοντέλο

Στις επιλογές που εμφανίζονται κάτω αριστερά, στο κελί “Geometry” επιλέγεται ολόκληρο το μοντέλο (με την επιλογή Ctrl+A). Και στο κελί Boundary επιλέγονται με Shift+click τα 2 στόμια, οριοθετώντας έτσι τα όρια του μοντέλου.



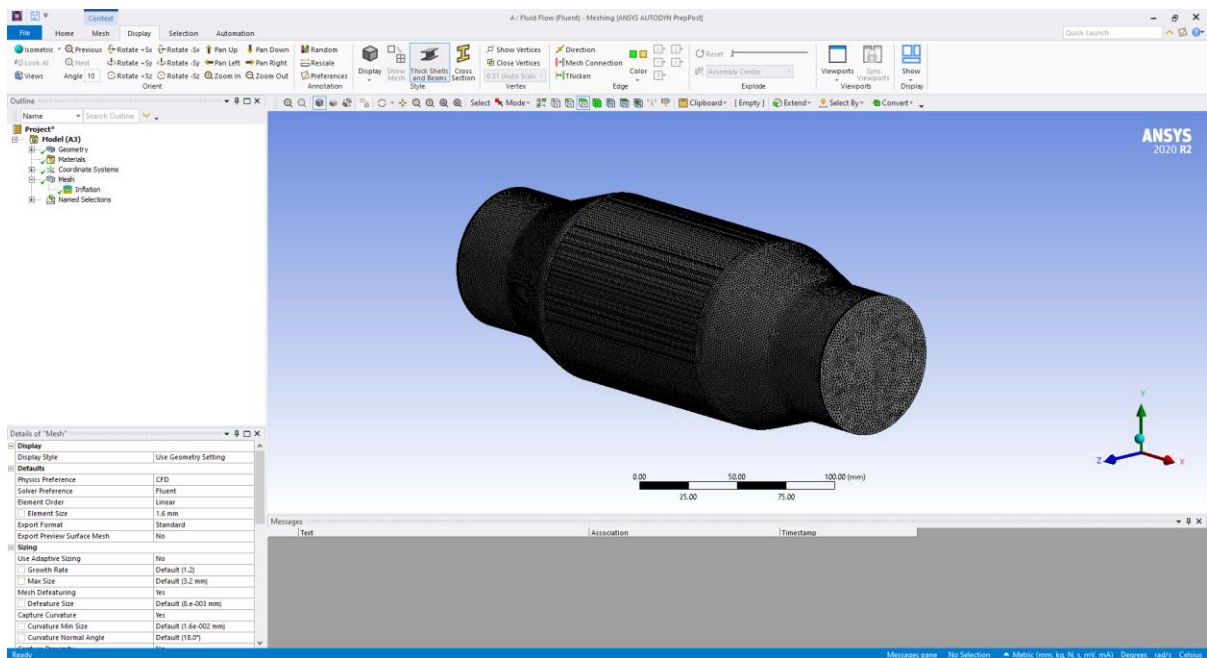
Εικόνα 29: Ορισμός των επιφανειών του inflation του μοντέλου

Έπειτα, αφού επιλεγθεί πάλι το Mesh, ορίζουμε τις διαστάσεις του πλέγματος του εκάστοτε μοντέλου, με εύρος τιμών για όλα τα μοντέλα από 1.6mm έως 3.0, αφού μέσω της μεθόδου δοκιμής και σφάλματος, παρατηρήθηκε ότι όλες οι αναλύσεις έφτασαν σε κατάσταση σύγκλισης (convergence) σε εύλογο χρονικό διάστημα και επαναλήψεις.



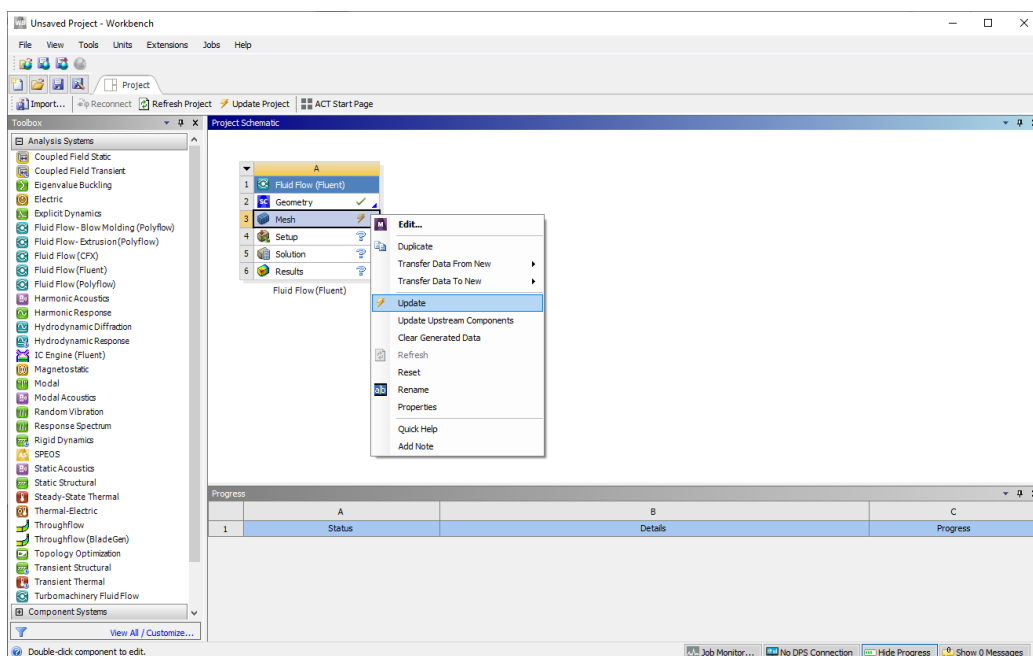
Εικόνα 30: Διαδικασία πλεγματοποίησης του μοντέλου και ορισμός μεγέθους πλέγματος

Αφού ολοκληρωθεί με επιτυχία η διαδικασία της πλεγματοποίησης του μοντέλου, θα εμφανιστεί το τρισδιάστατο σχέδιο με το πλέγμα, αν δε γίνει η πλεγματοποίηση με επιτυχία θα εμφανιστεί κάποιο μήνυμα σφάλματος.

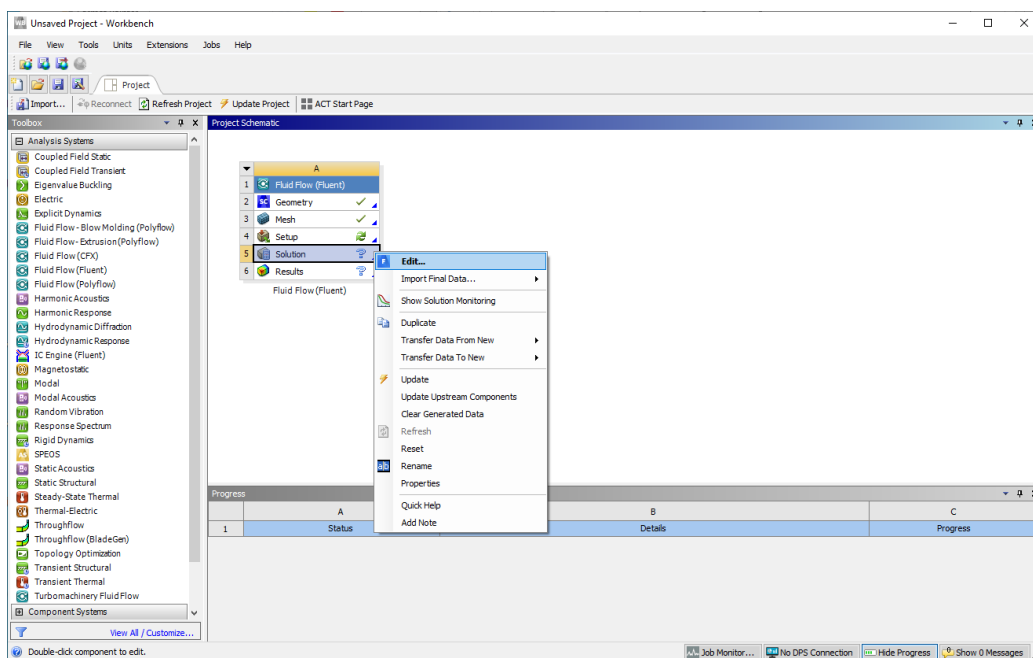


Εικόνα 31: Τελική απεικόνιση του μοντέλου με επιτυχής πλεγματοποίηση

Έπειτα, από το κεντρικό μενού του Fluent επιλέγεται το Mesh και στη συνέχεια η επιλογή Update που θα ενημερώσει το λογισμικό με το νέο ανανεωμένο πλέγμα του.



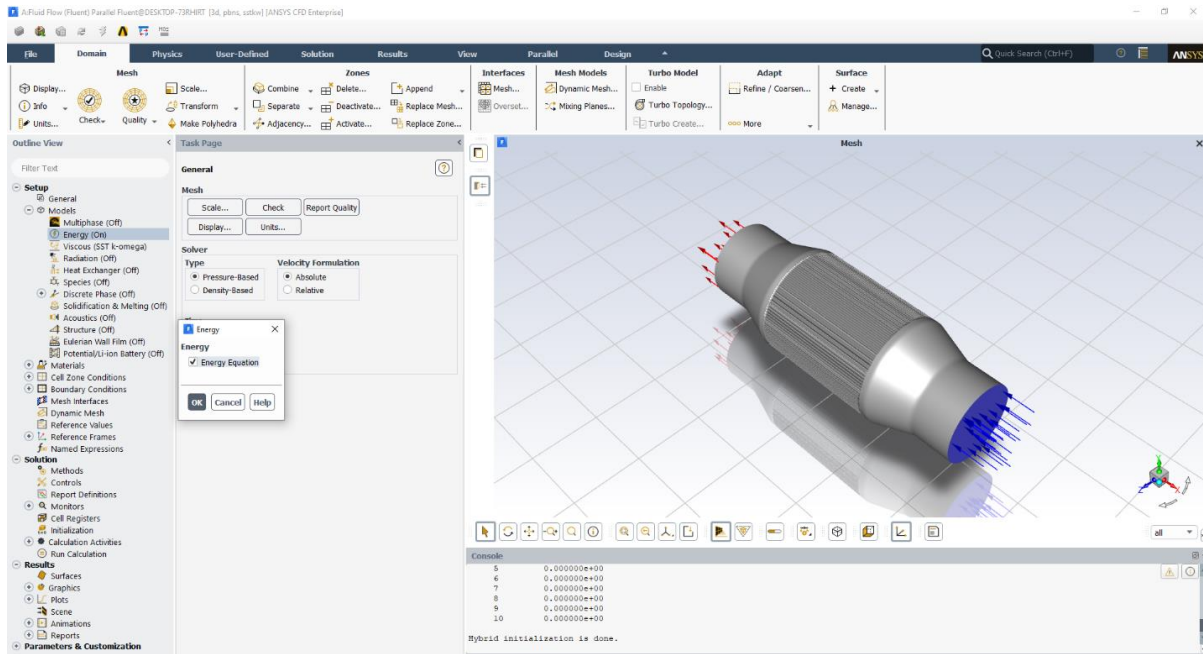
Εικόνα 32: Ενημέρωση του λογισμικού με το τελικό πλέγμα



Εικόνα 33: Εκκίνηση του λογισμικού επίλυσης πεπερασμένων Fluent

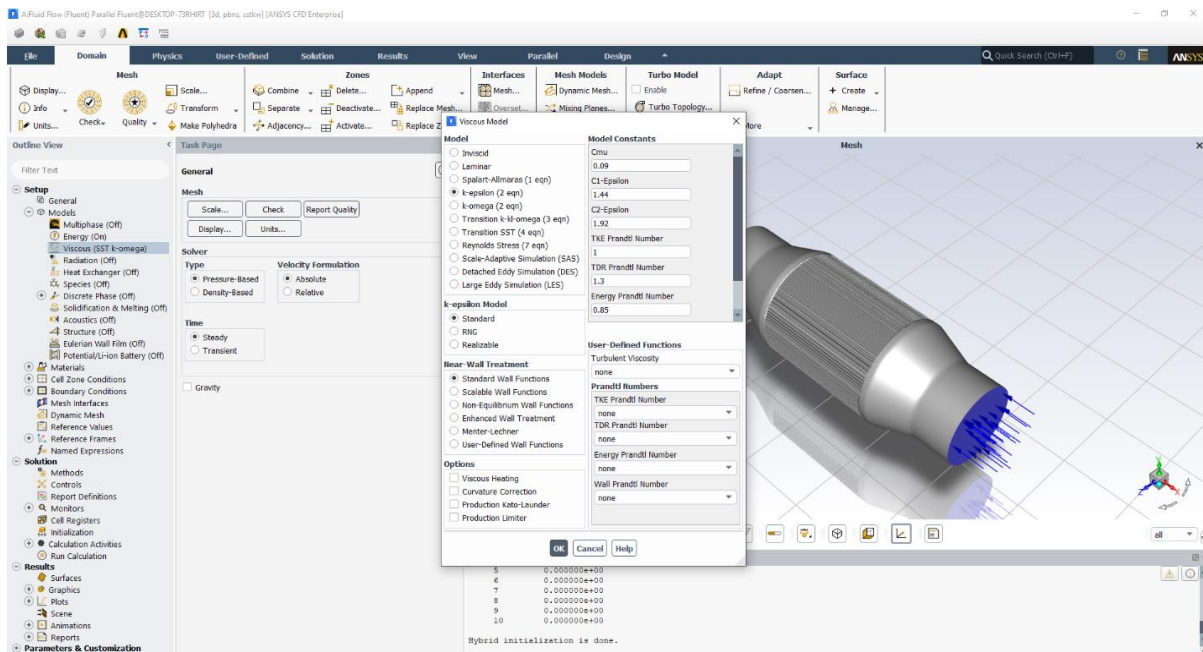
Εντός του περιβάλλοντος επίλυσης του μοντέλου, επιλέγεται από το μενού αριστερά το Setup, και μετά το Model και Energy το οποίο και ενεργοποιείται για να είναι εφικτός ο

ορισμός της θερμοκρασίας των εισερχόμενων καυσαερίων, επιλύοντας και ως προς την ενέργεια.



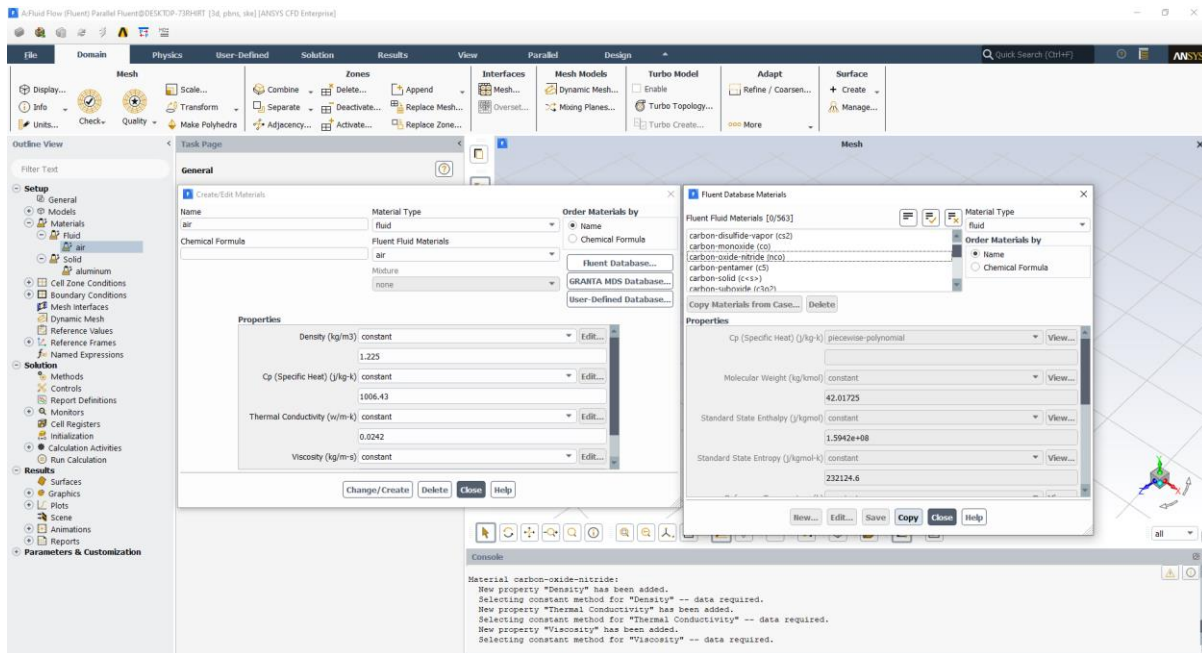
Εικόνα 34: Ενεργοποίηση της εξίσωσης ενέργειας

Στο ίδιο ακριβώς μενού, και για την επίλυση του παρόντος προβλήματος επιλέγεται στη κατηγορία Viscous το k-epsilon (μοντέλο 2 εξισώσεων).



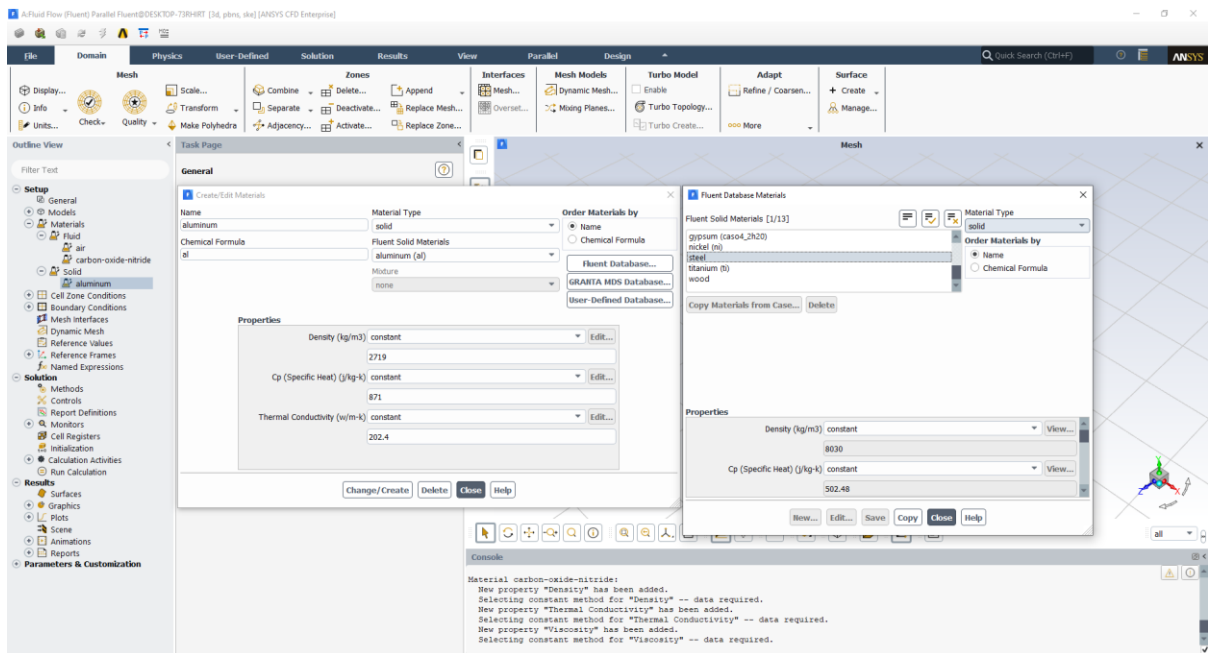
Εικόνα 35: Επιλογή του μοντέλου επίλυσης k-epsilon

Έπειτα θα πρέπει να γίνει ο καθορισμός των υλικών, και έτσι από το αριστερό μενού επιλέγεται η καρτέλα «Materials», «Fluid» και στη συνέχεια «Fluent Database» και carbon-oxide-nitride που περιγράφει καλύτερα τη σύνθεση των καταλυτικών υποπροϊόντων.



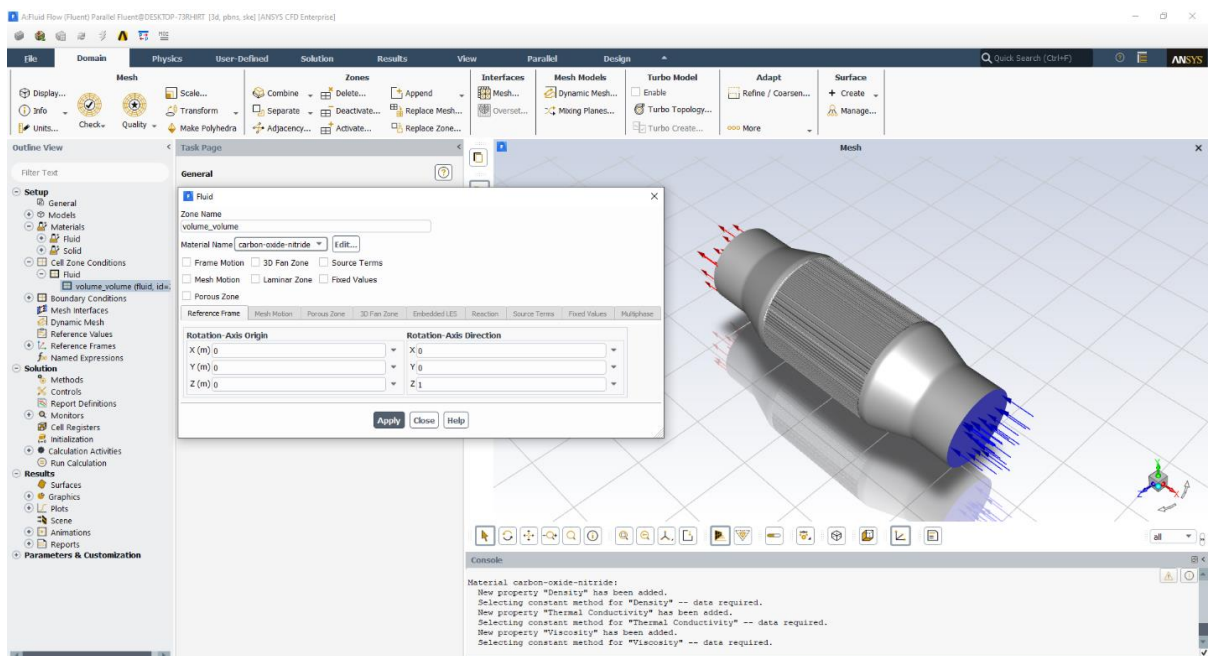
Εικόνα 36: Επιλογή αέριων υλικών στο μοντέλο

Η ίδια ακριβώς μέθοδος εφαρμόζεται και για τα στερεά σώματα του μοντέλου, έτσι επιλέγεται σαν υλικό το αστάλι (steel).



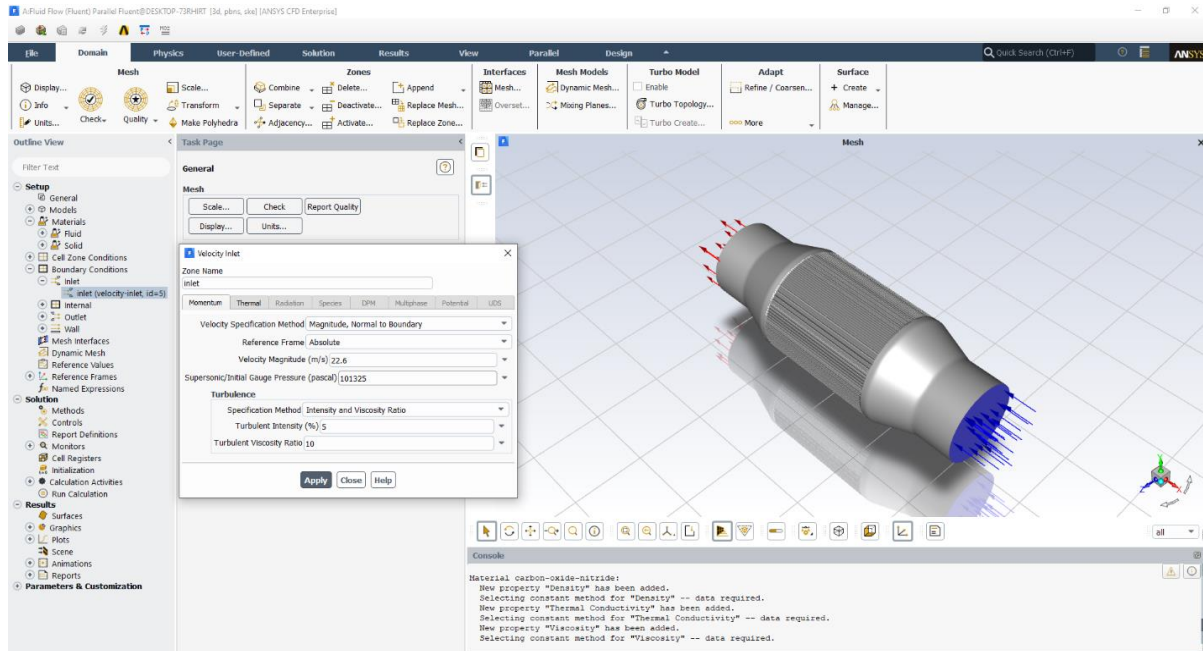
Εικόνα 37: Επιλογή στερεών υλικών στο μοντέλο

Από το μενού αριστερά επιλέγεται το «Cell Zone Conditions», «Fluid» και προστίθεται το υλικό carbon-oxide-nitride αντί του αρχικά προεπιλεγμένου «air».



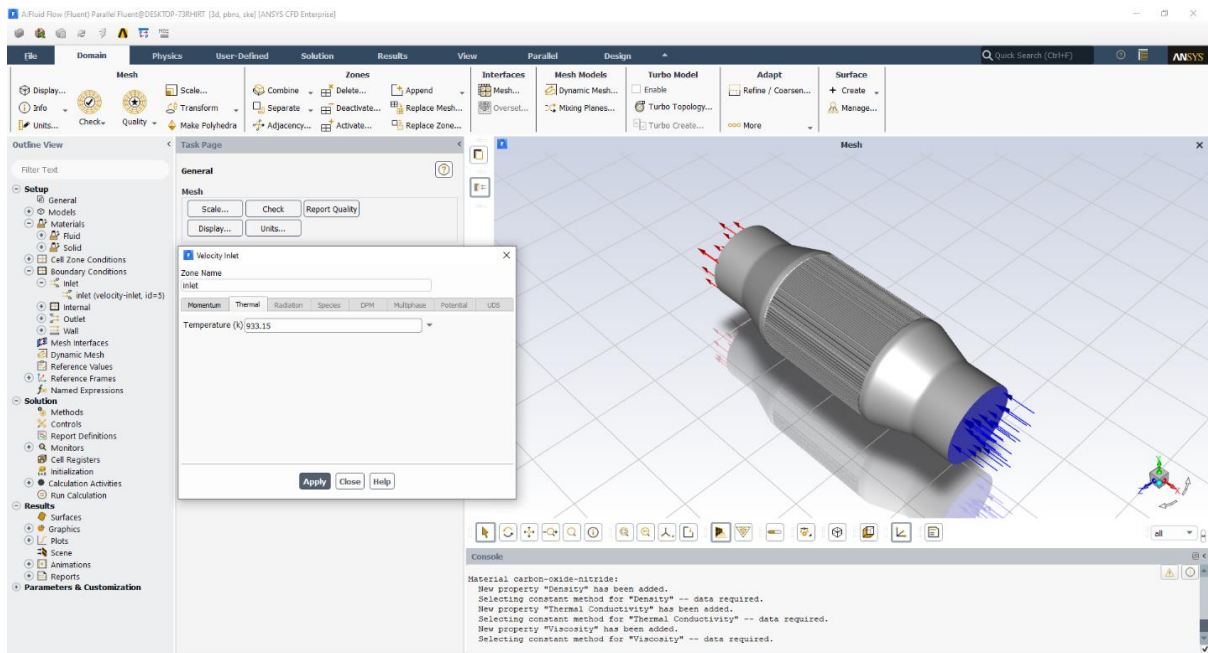
Εικόνα 38: Επιλογή αέριου υλικού στο μοντέλο

Στη συνέχεια στο μενού «Boundary Conditions» ορίζονται σημαντικές παράμετροι του συστήματος, όπως η ταχύτητα διερχόμενων αερίων και πίεση αυτών, για τα οποία εύλογα ορίστηκαν οι τιμές 22.6 m/s και 101325 Pascal αντίστοιχα.



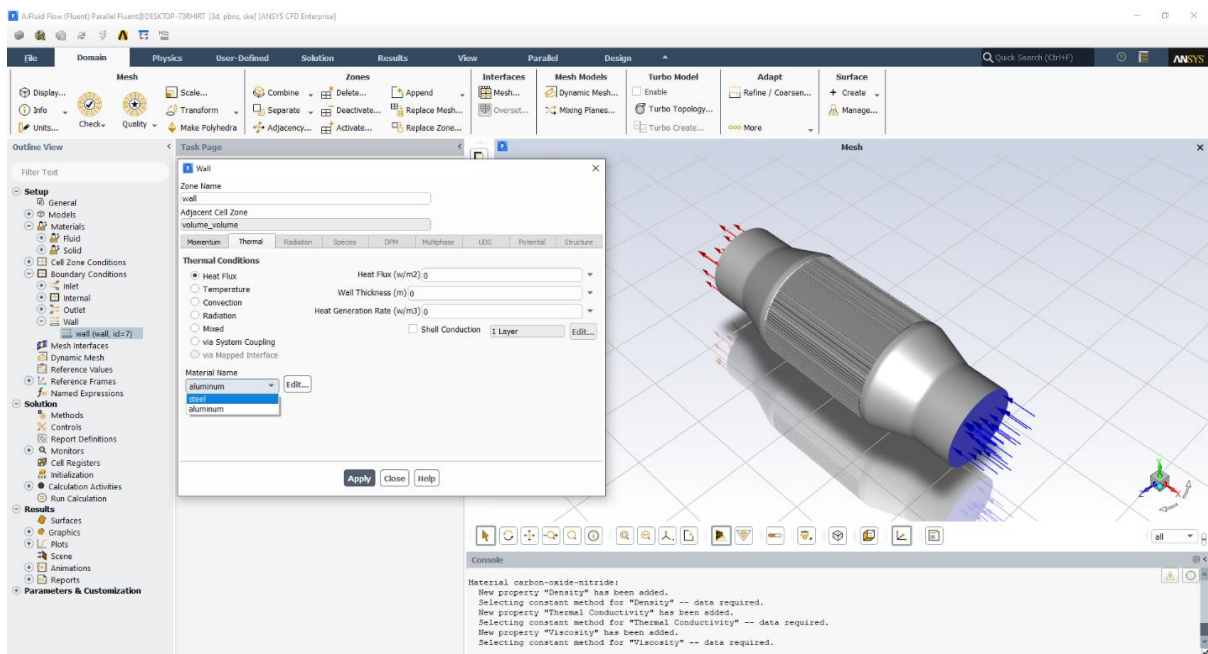
Εικόνα 39: Ορισμός οριακών συνθηκών του μοντέλου (ταχύτητα και πίεση)

Στο ίδιο μενού αλλά στην αμέσως δεξιά καρτέλα, ορίζεται η θερμοκρασία των εισερχόμενων αερίων, ήτοι 933.15K.



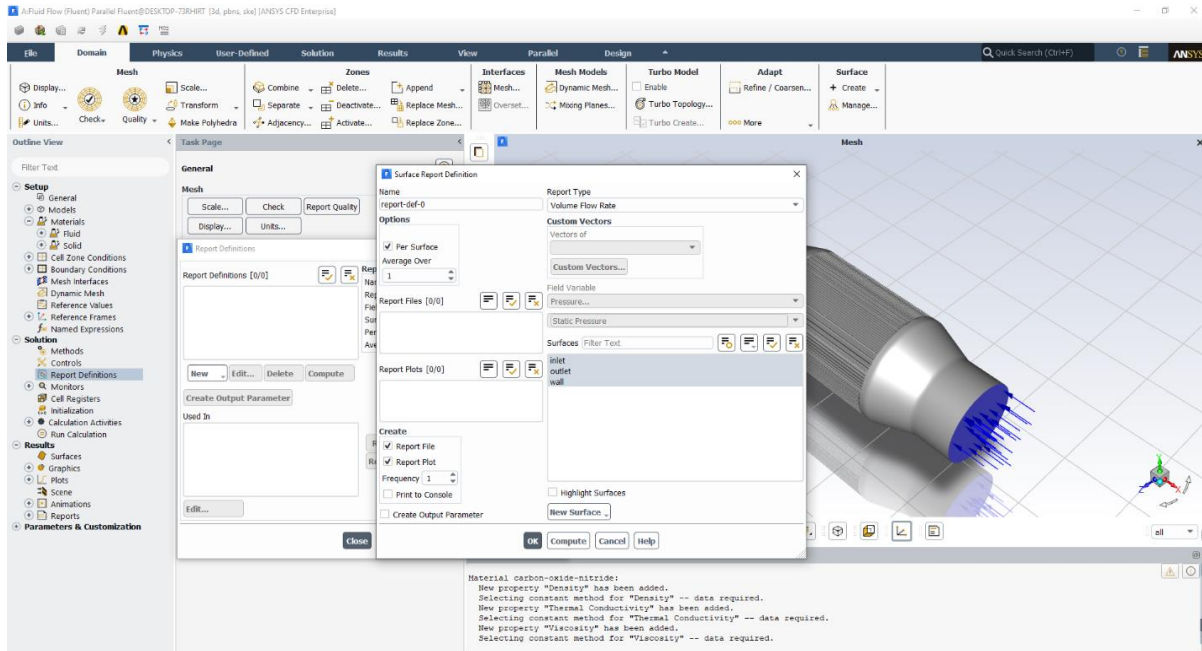
Εικόνα 40: Ορισμός οριακών συνθηκών του μοντέλου (θερμοκρασία)

Στην υποκατηγορία «Boundary Conditions» και «Wall» στη καρτέλα «Thermal» επιλέγεται το ασάλι σαν υλικό των τοιχωμάτων.



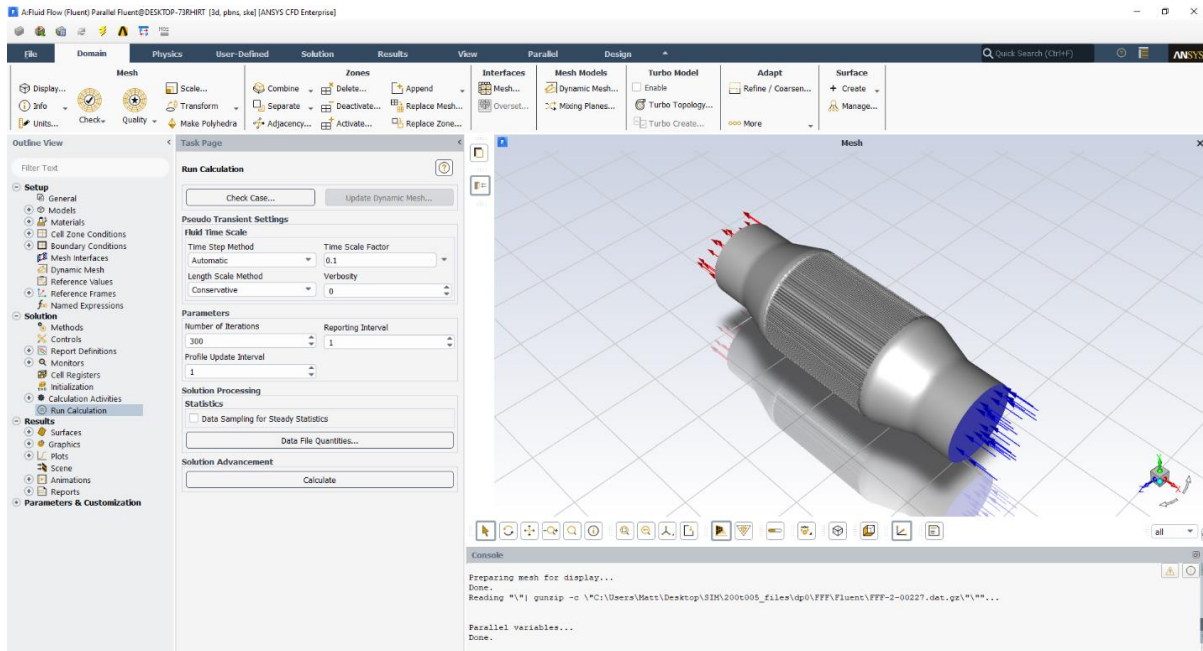
Εικόνα 41: Ορισμός των υλικών των στερεών σωμάτων

Σαν επιπλέον διάγραμμα πληροφοριών, επιλέγουμε το «Report Definitions», «New», «Volume Flow Rate», επιλέγοντας σαν επιφάνειες τα «inlet», «outlet» και «wall» καθώς και τις επιλογές «Per Surface», «Report File» και «Report Plot».



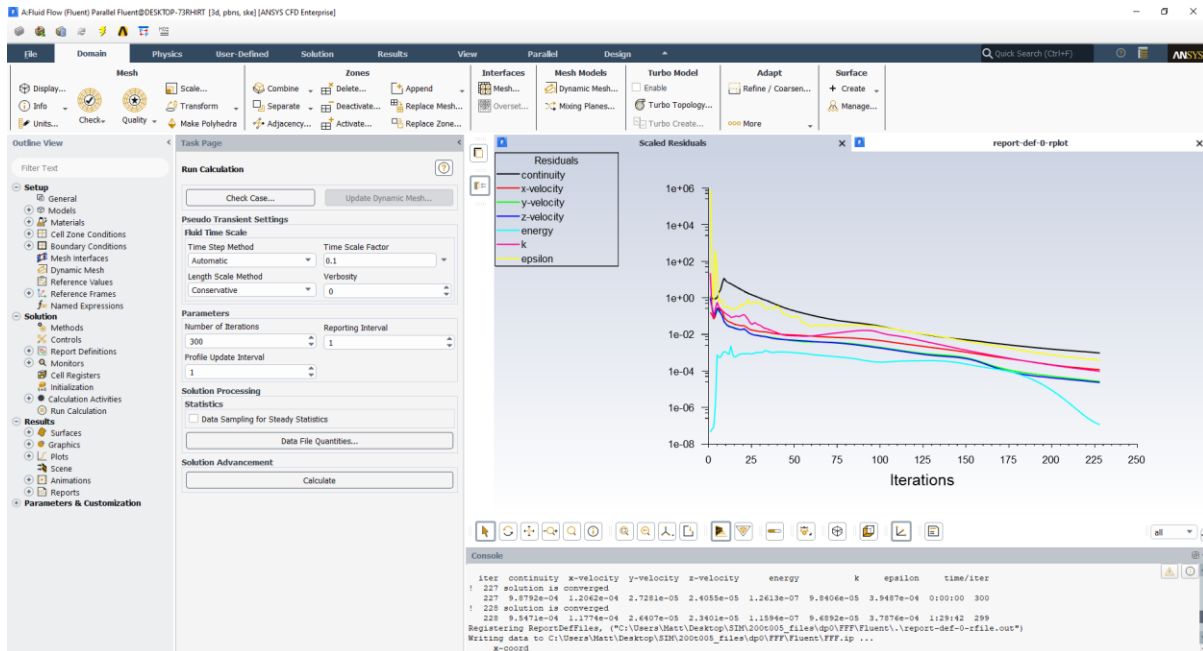
Εικόνα 42: Ορισμός του «Surface Report Definition» πριν την ανάλυση

Με την επιλογή «Run Calculation», μπορεί κανείς να «τρέξει» την ανάλυση του μοντέλου, εισάγοντας έναν επιθυμητό αριθμό επαναλήψεων (Number of iterations) αλλά και την σωστή τιμή στον παράγοντα χρονικής κλίμακας (Time Scale Factor). Εν προκειμένω, για τα μοντέλα με 100CPSI επιλέχθηκε η τιμή (0.1 έως 1s) μειώνοντας σταδιακά για τα μοντέλα με πυκνότερο καταλύτη (400CPSI, 0.01 έως 0.001s).



Εικόνα 43: Τελικό μενού επιλογών πριν την ανάλυση

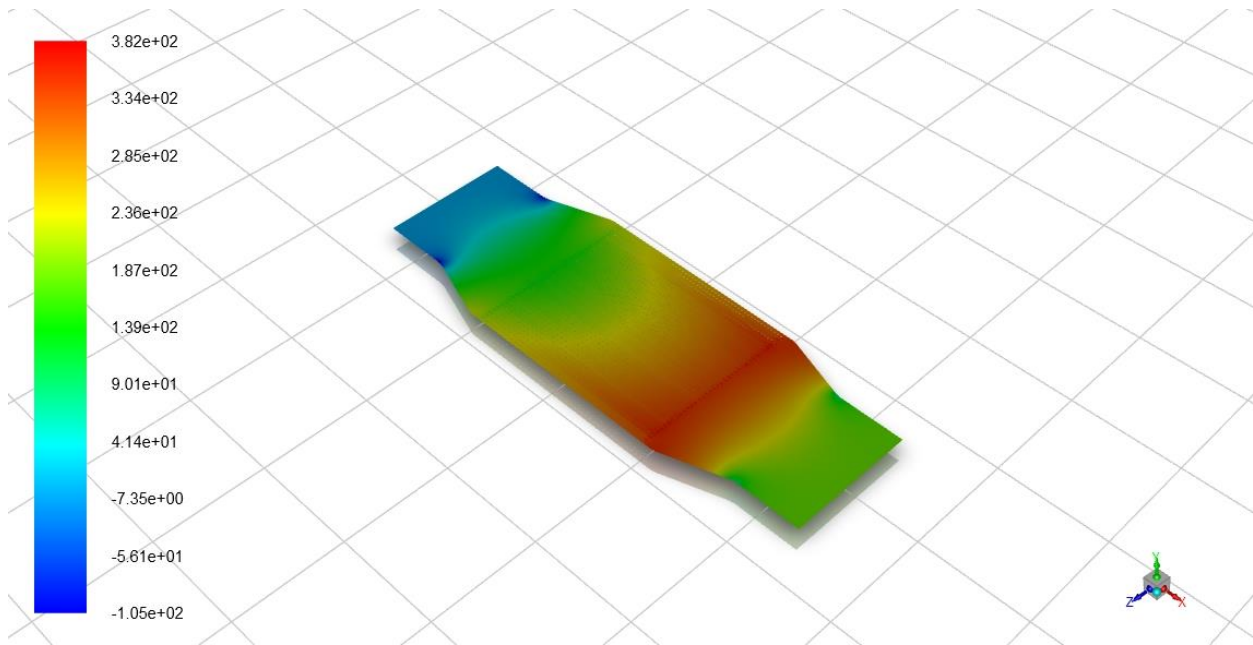
Κατά τη διάρκεια της ανάλυσης, εμφανίζεται η καρτέλα «Scaled Residuals» όπου μπορούμε να βλέπουμε τη «τάση» της ανάλυσης προς τη σύγκλιση. Κατά την επαναληπτική αυτή διαδικασία, εφόσον οι τιμές αυτές είναι φθάσουν κάτω από τα προκαθορισμένα κριτήρια σύγκλισης, τότε η ανάλυση σταματάει, δίνοντας την πληροφορία «solution is converged». Παρατηρείται ότι, παρόλο που επιλέχθηκε αρχικώς να γίνουν 300 επαναλήψεις, η επίλυση σταμάτησε αρκετά νωρίτερα καθώς έφτασε σε κατάσταση σύγκλισης, καθιστώντας κάθε επιπλέον επανάληψη, μη καθοριστική για τα τελικά αποτελέσματα.



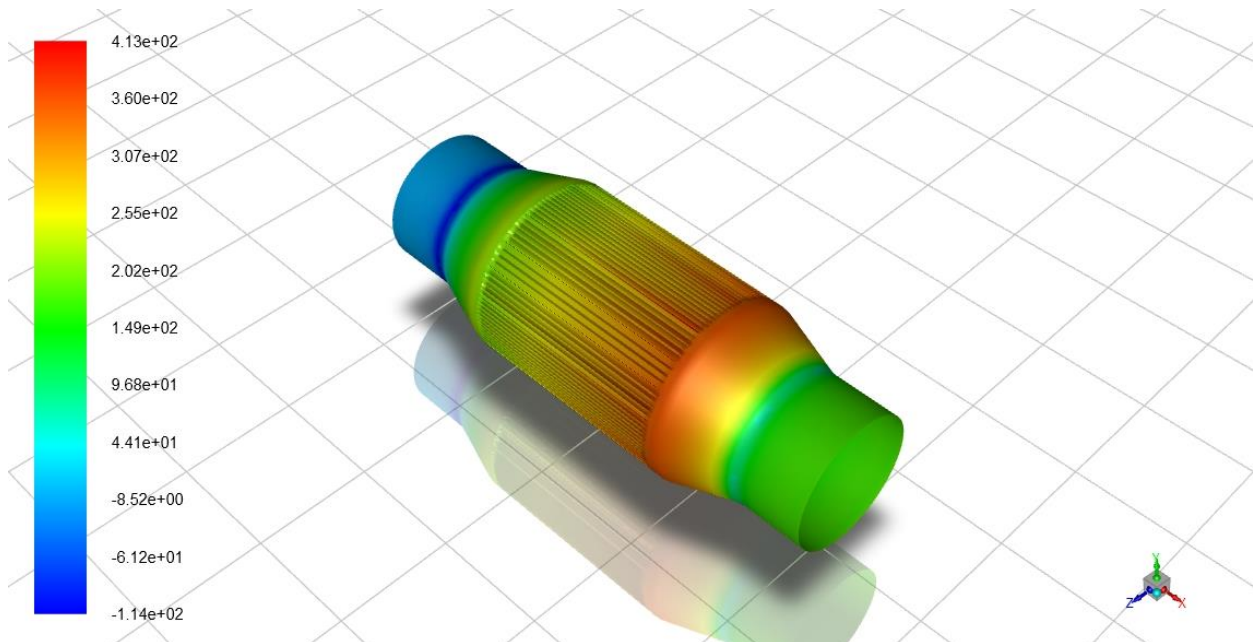
Εικόνα 44:Πτωτική πορεία των scaled residuals έως τη σύγκλιση των αποτελεσμάτων

4.2 Αποτελέσματα Αναλύσεων στο ANSYS WORKBENCH 2020R2

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.05mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 382 Pascal με ελάχιστη τα -105 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα. Σε όλες τις επόμενες αναλύσεις έχει τεθεί η κλίμακα της συγκεκριμένης ανάλυσης ως σημείο αναφοράς. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομιών εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 182.41933 Pa.



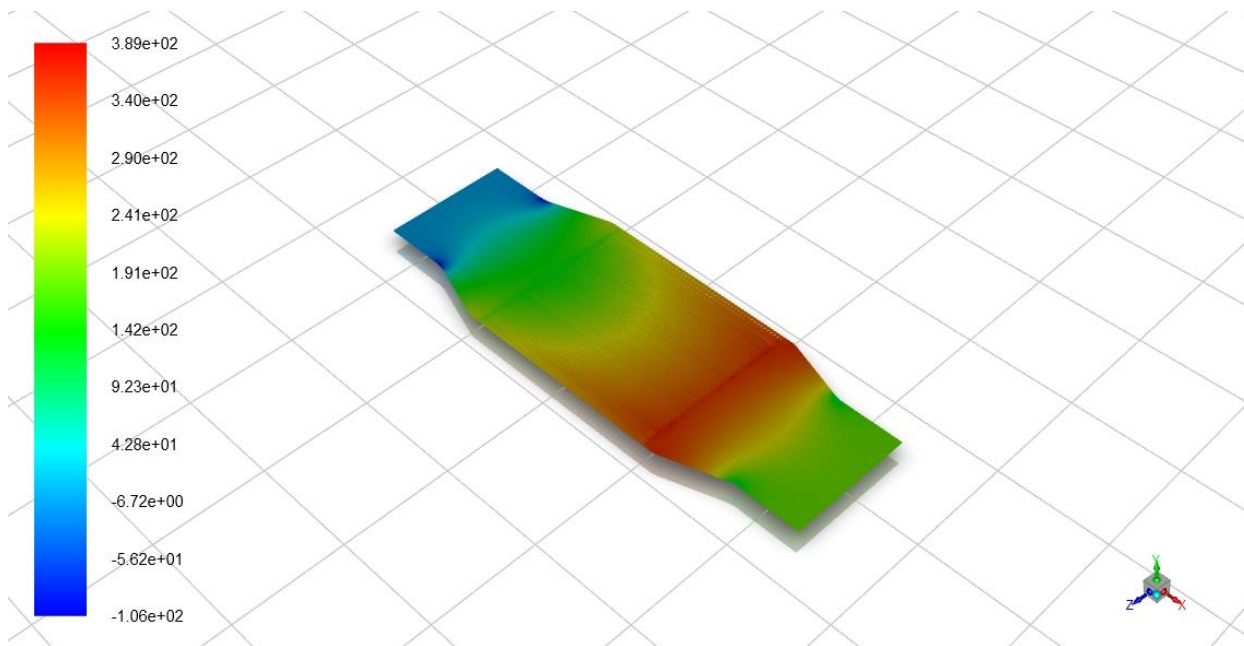
Εικόνα 45: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm



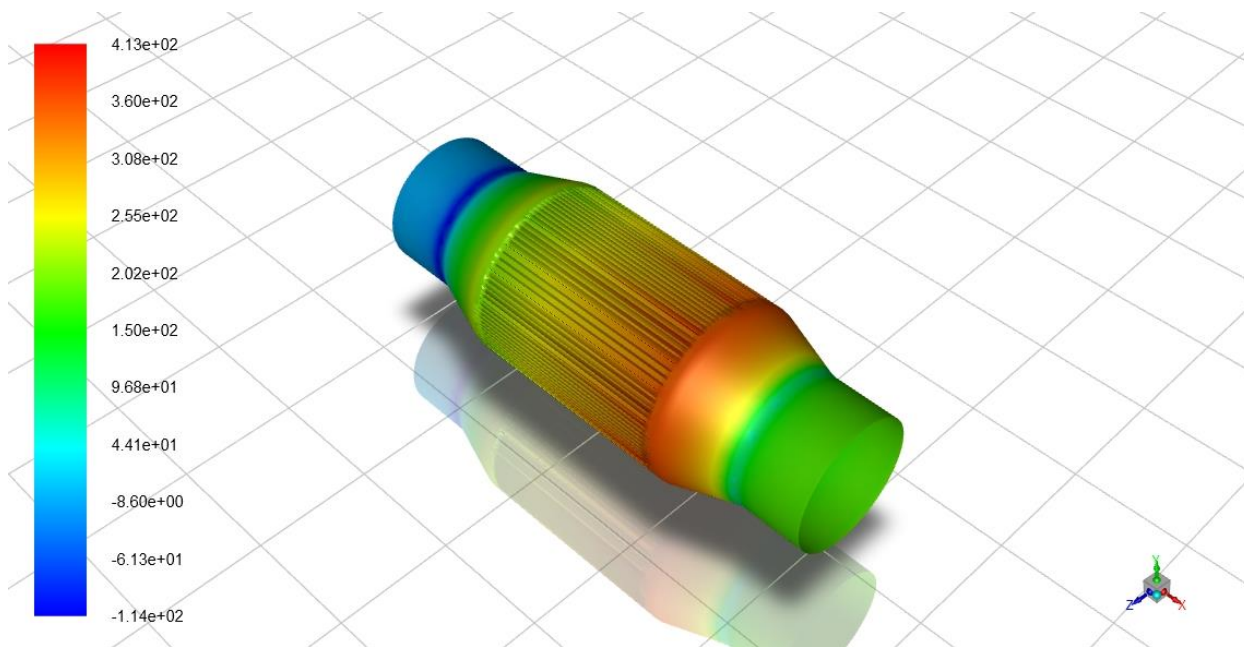
Εικόνα 46: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.06mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 389 Pascal με ελάχιστη τα -106 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά

πίεσης μεταξύ των στομίων εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 187.54178 Pa.



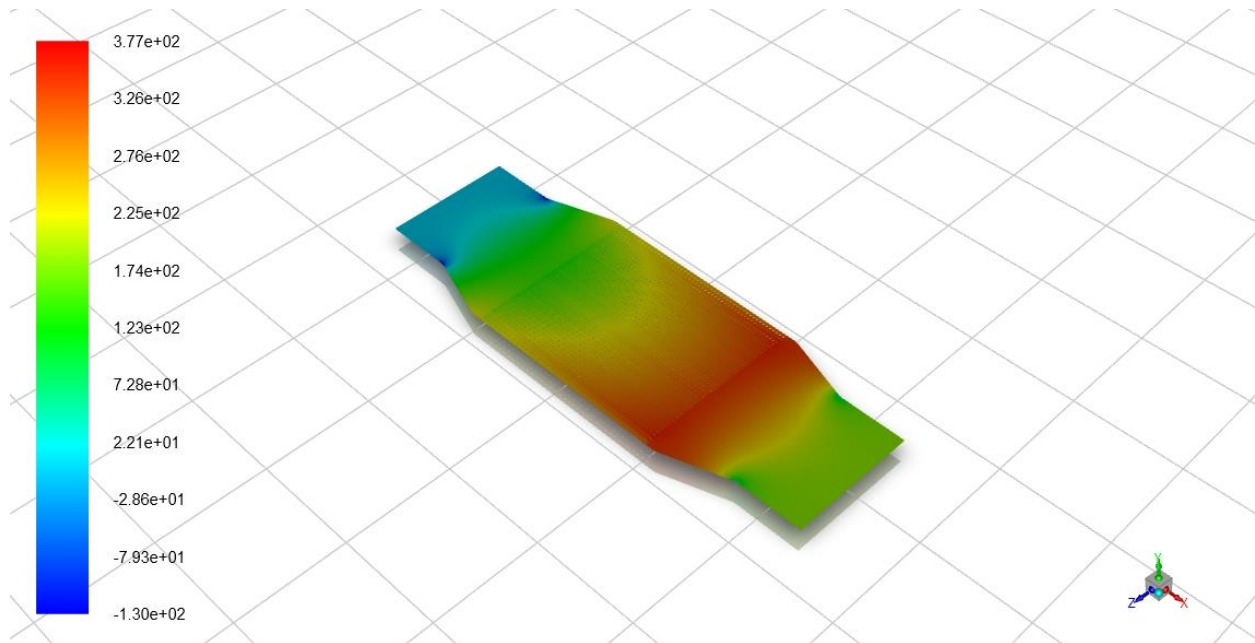
Εικόνα 47: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.06mm



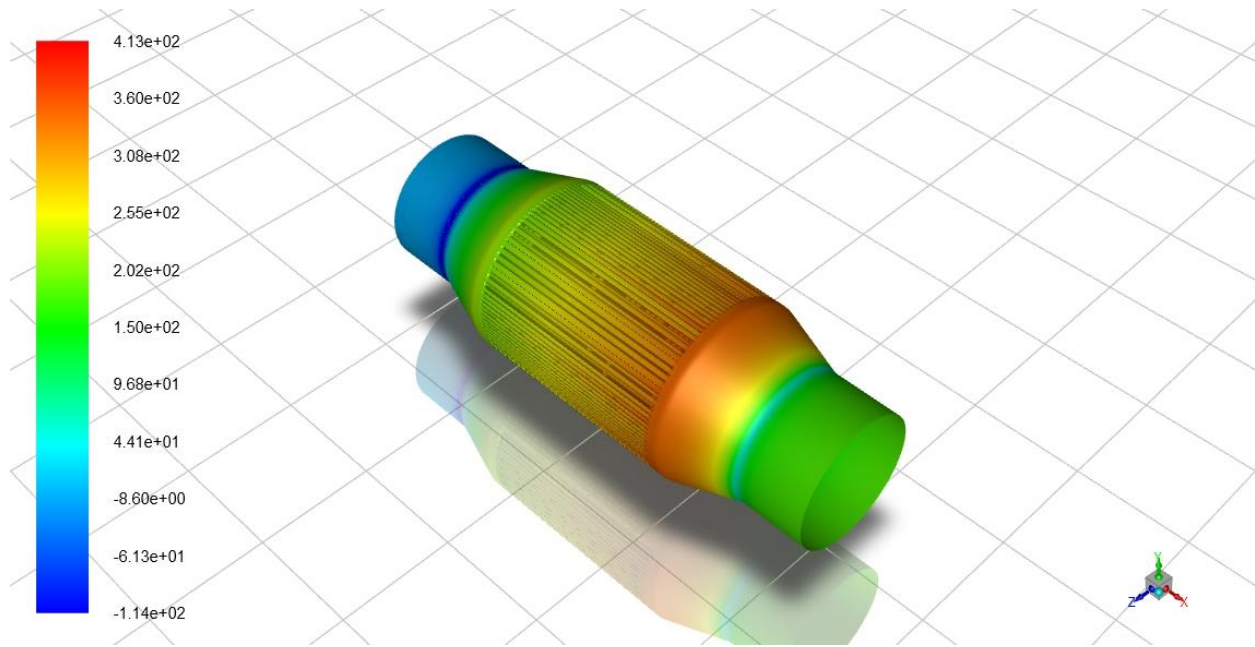
Εικόνα 48: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.06mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.08mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της

τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 377 Pascal με ελάχιστη τα -130 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομιών εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 184.11043 Pa.

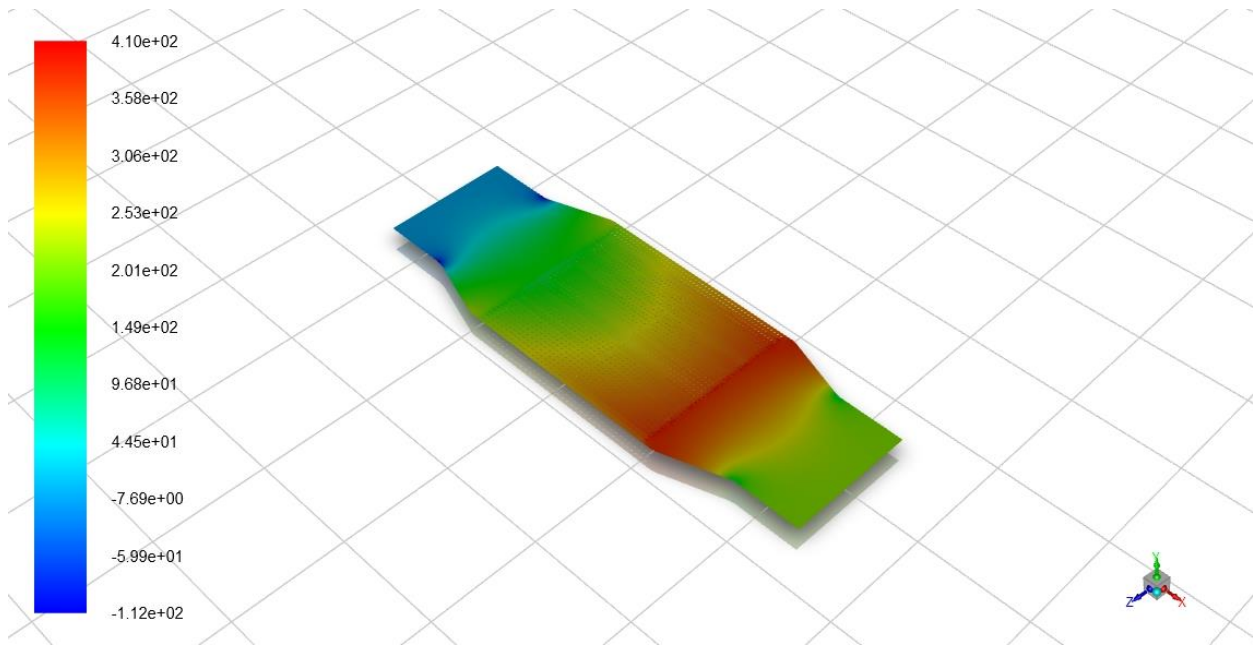


Εικόνα 49: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.08mm

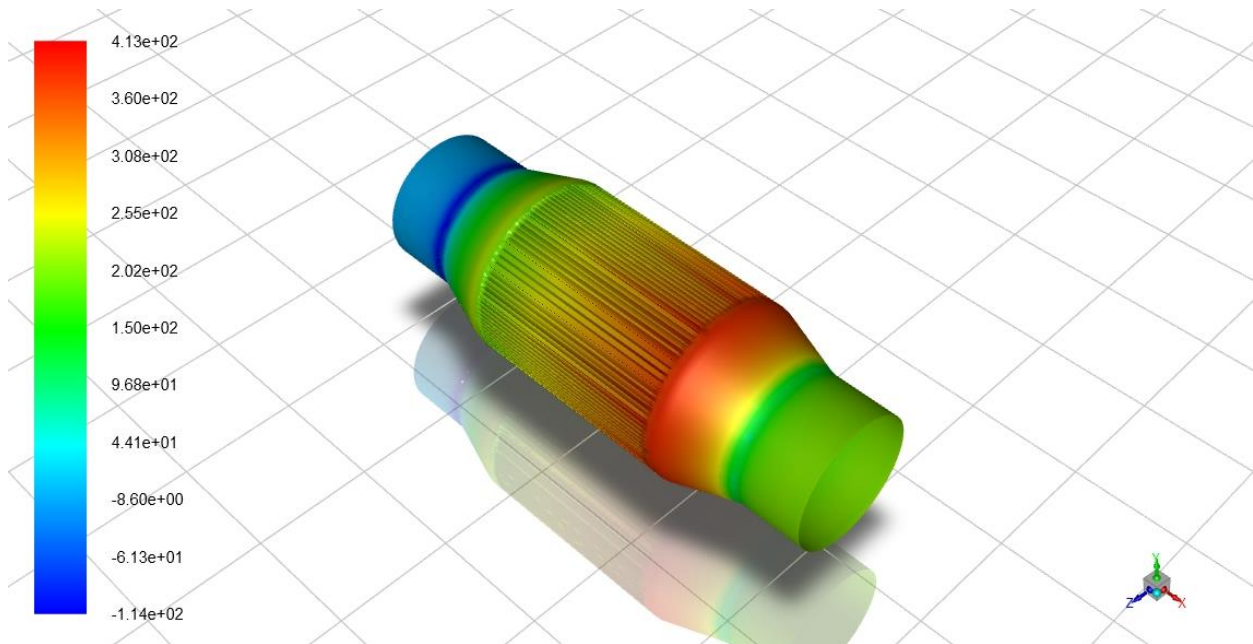


Εικόνα 50: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.08mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.12mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 410 Pascal με ελάχιστη τα -112 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομίων εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 211.15621 Pa.



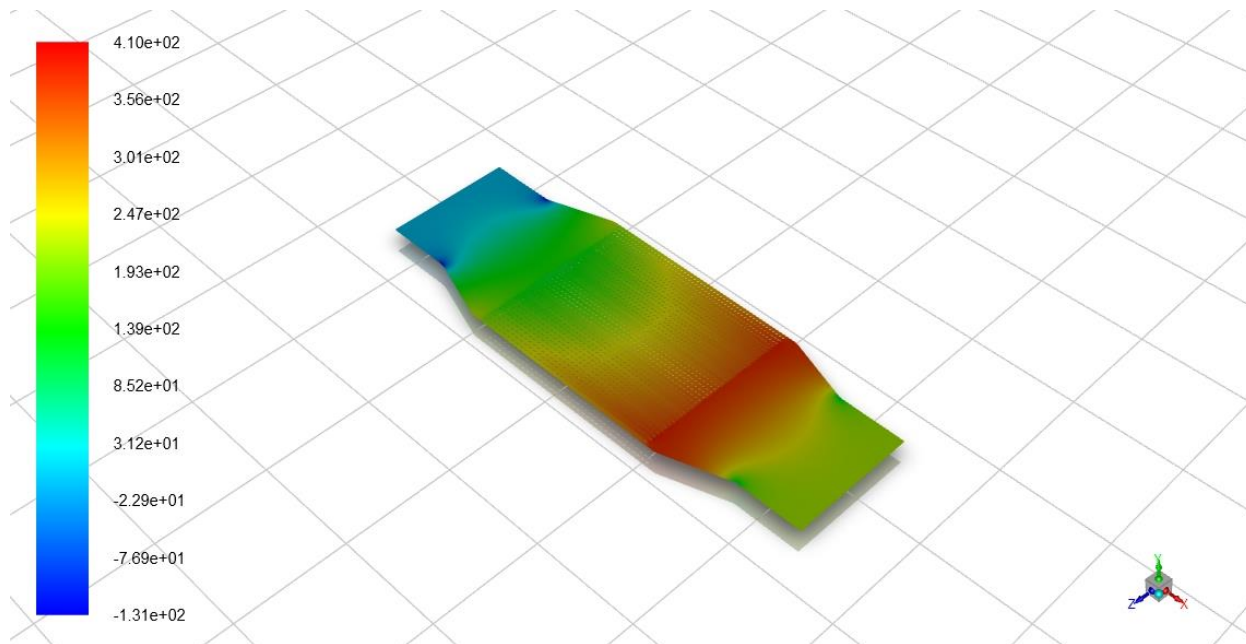
Εικόνα 51: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 100 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.12mm



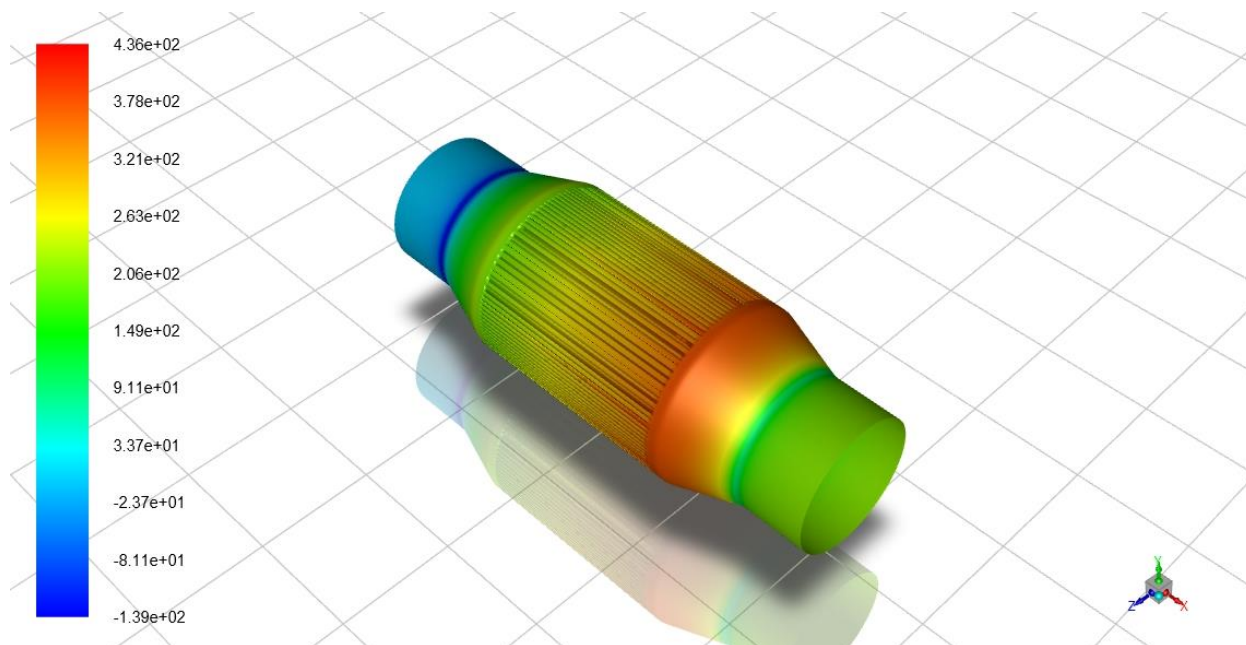
Εικόνα 52: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 100 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.12mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 100 κυφελών και πάχος τοιχωμάτων 0.16mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 410 Pascal με ελάχιστη τα -131 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε

σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυφελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομίων εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 216.86025 Pa.

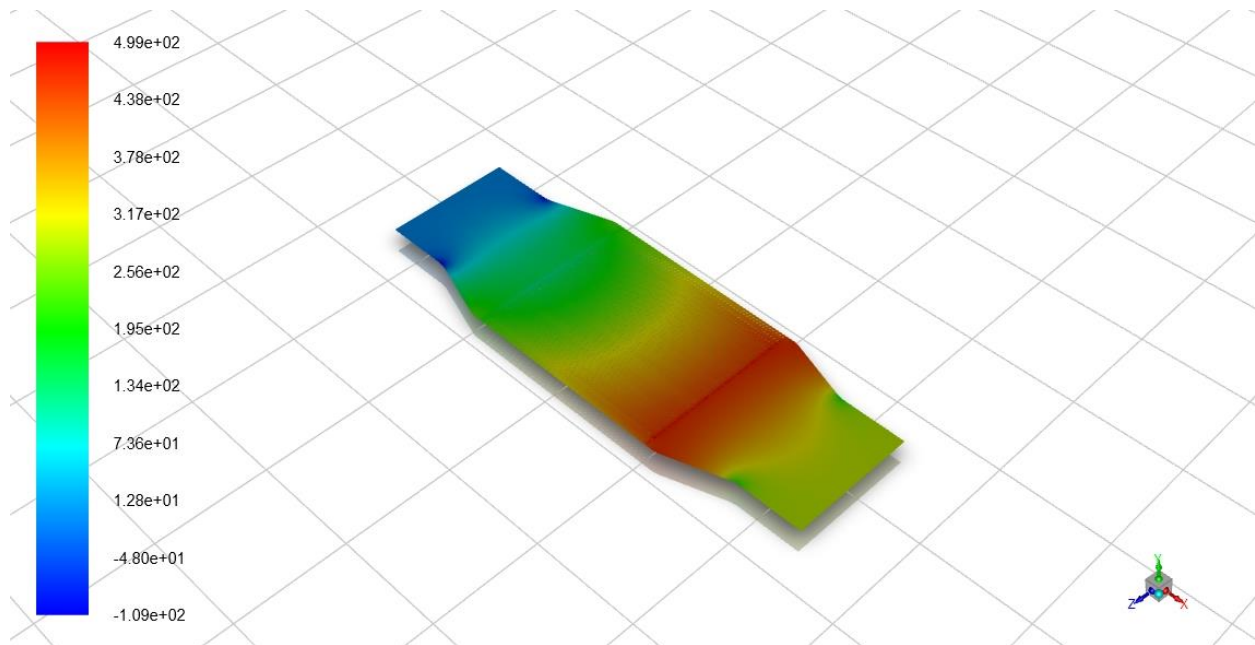


Εικόνα 53: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 100 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.16mm

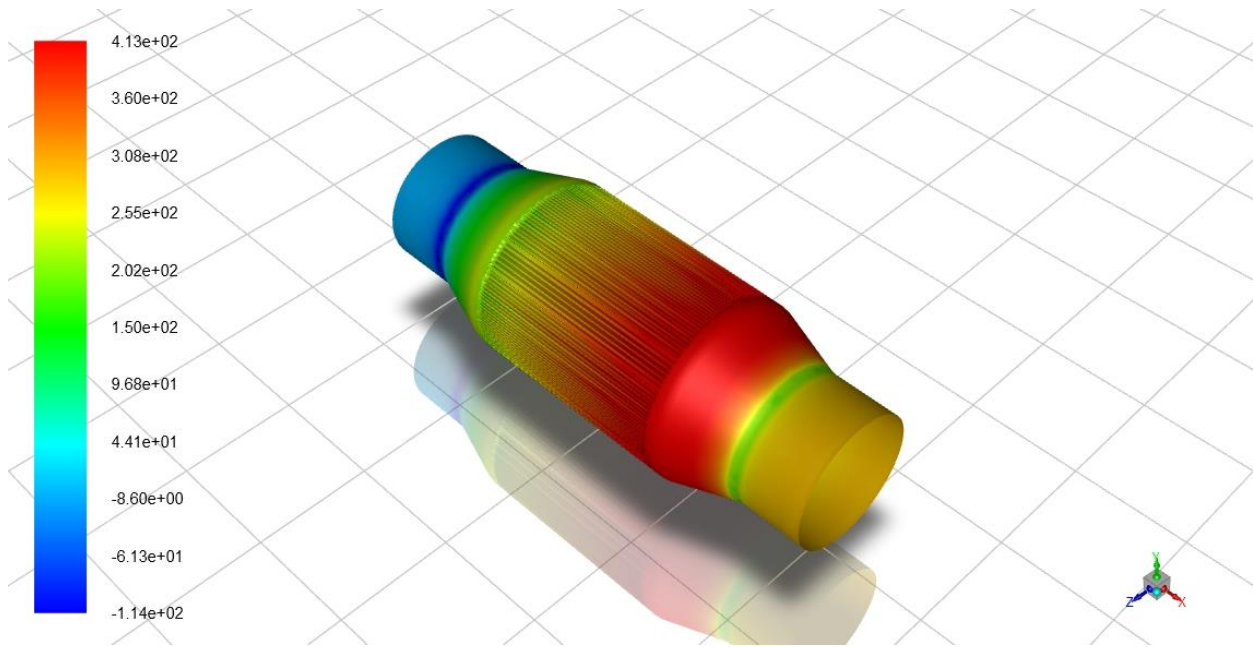


Εικόνα 54: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 100 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.16mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 200 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.05mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 499 Pascal με ελάχιστη τα -109 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομών εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 292.87735 Pa.

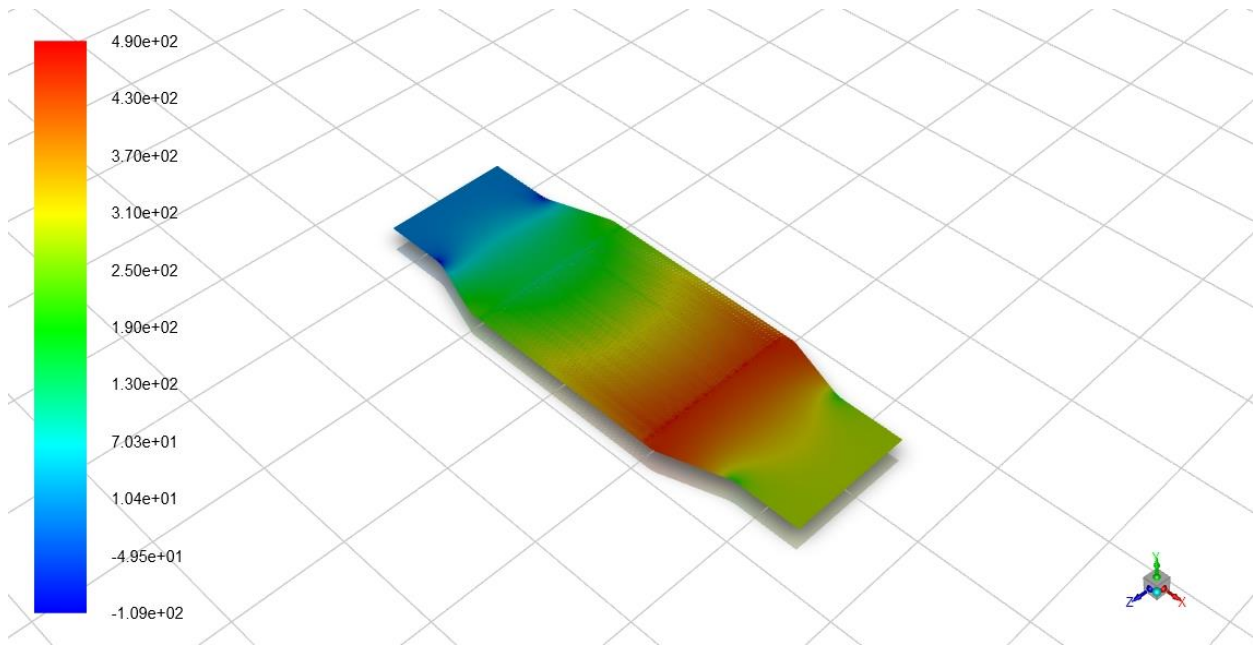


Εικόνα 55: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 200 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

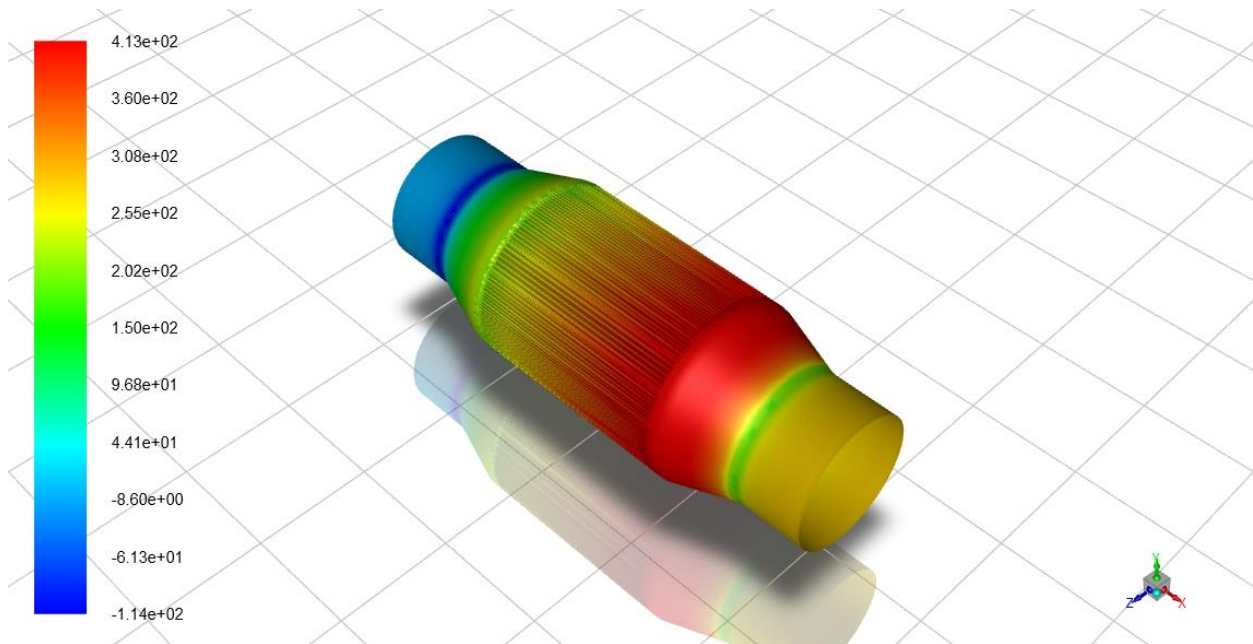


Εικόνα 56: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 200 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 200 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.06mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 490 Pascal με ελάχιστη τα -109 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομίων εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 285.3403 Pa.



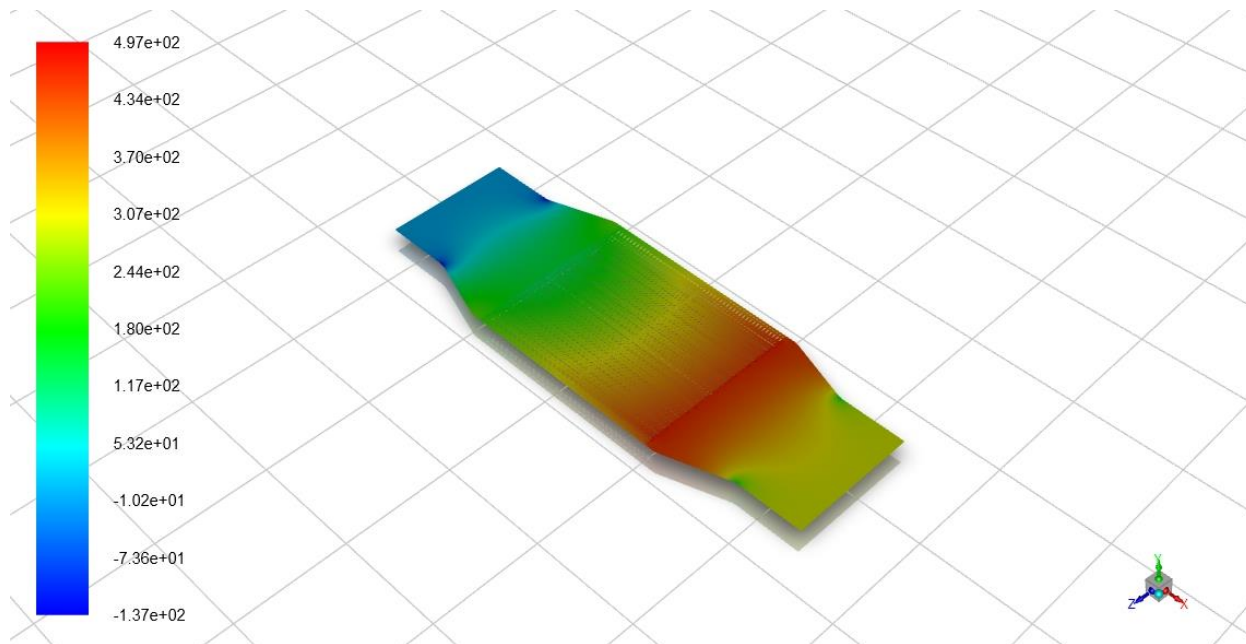
Εικόνα 57: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 200 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.06mm



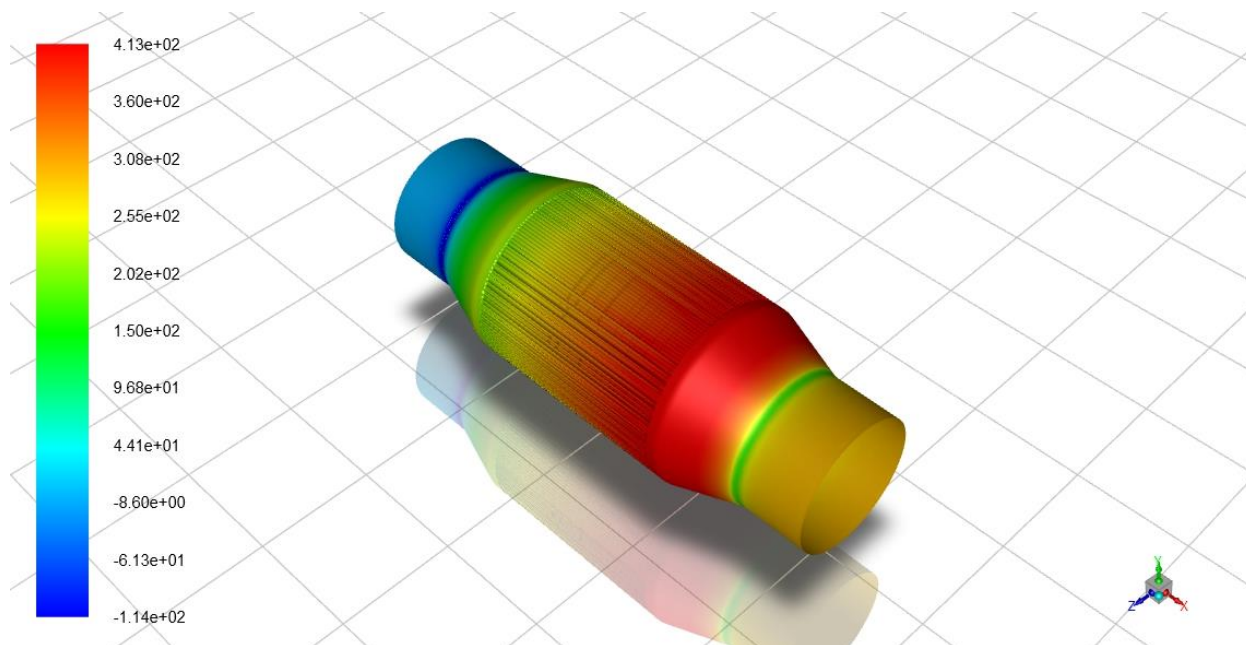
Εικόνα 58: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 200 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.06mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 200 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.08mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 497 Pascal με ελάχιστη τα -137 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε

σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυφελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομιών εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 296.04374 Pa.

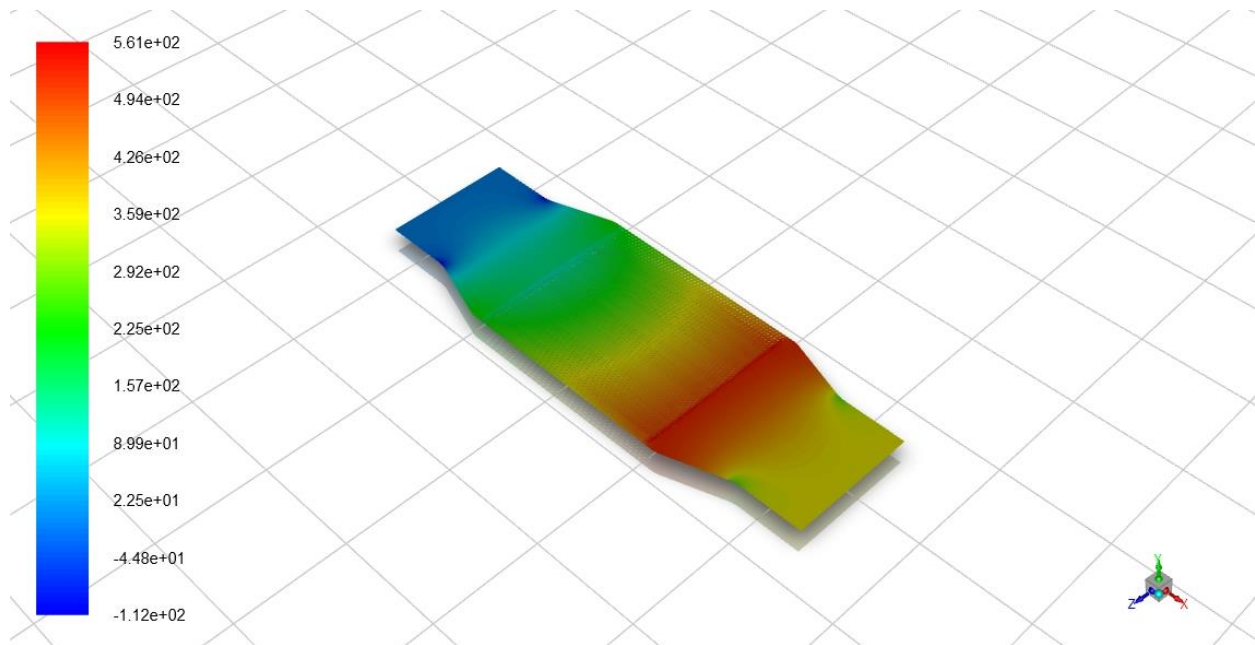


Εικόνα 59: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 200 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.08mm

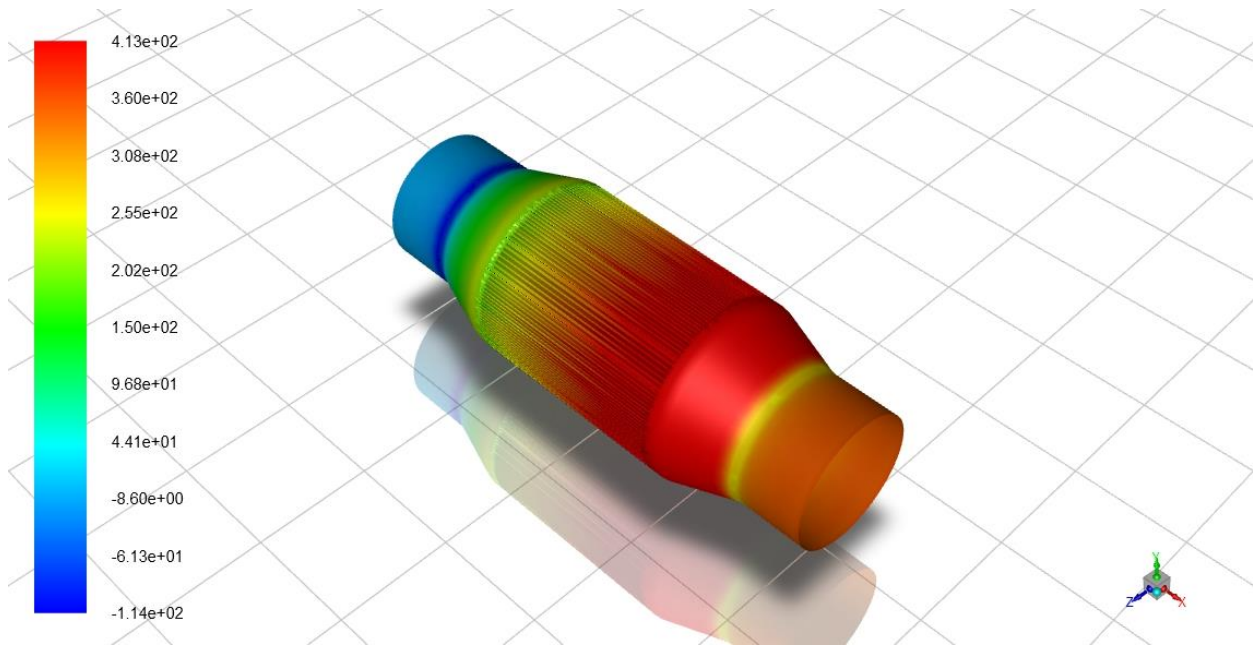


Εικόνα 60: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 200 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.08mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 200 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.12mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 561 Pascal με ελάχιστη τα -112 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομιών εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 355.03755 Pa.

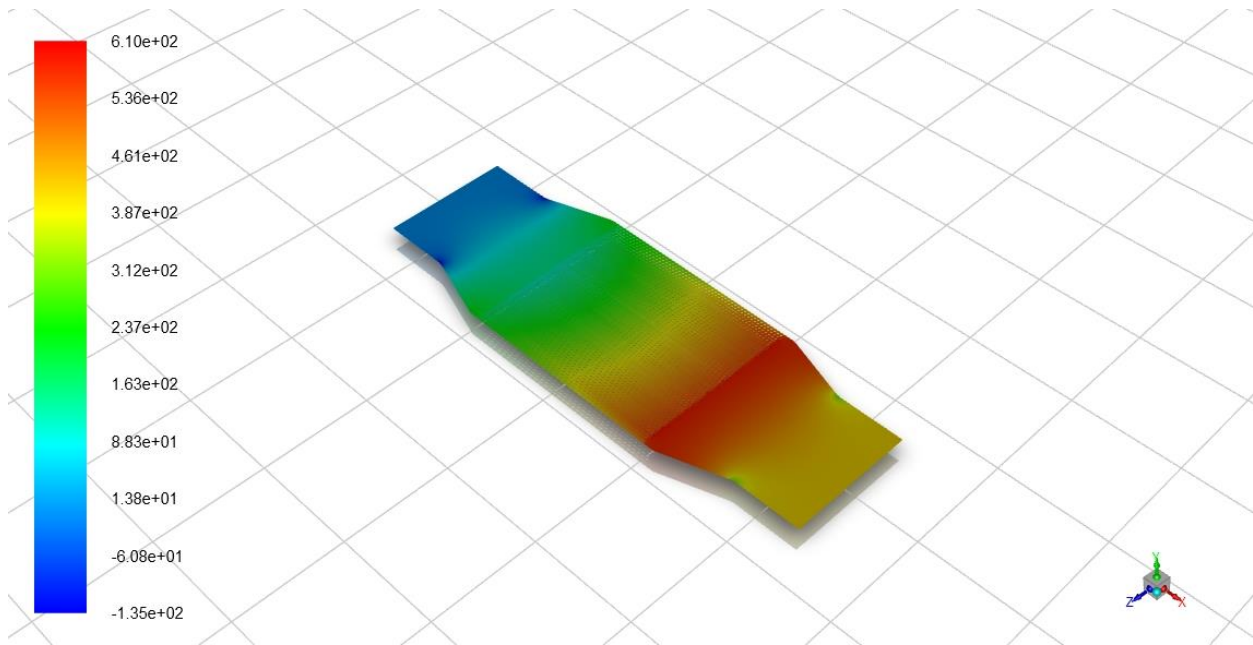


Εικόνα 61: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 200 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.12mm

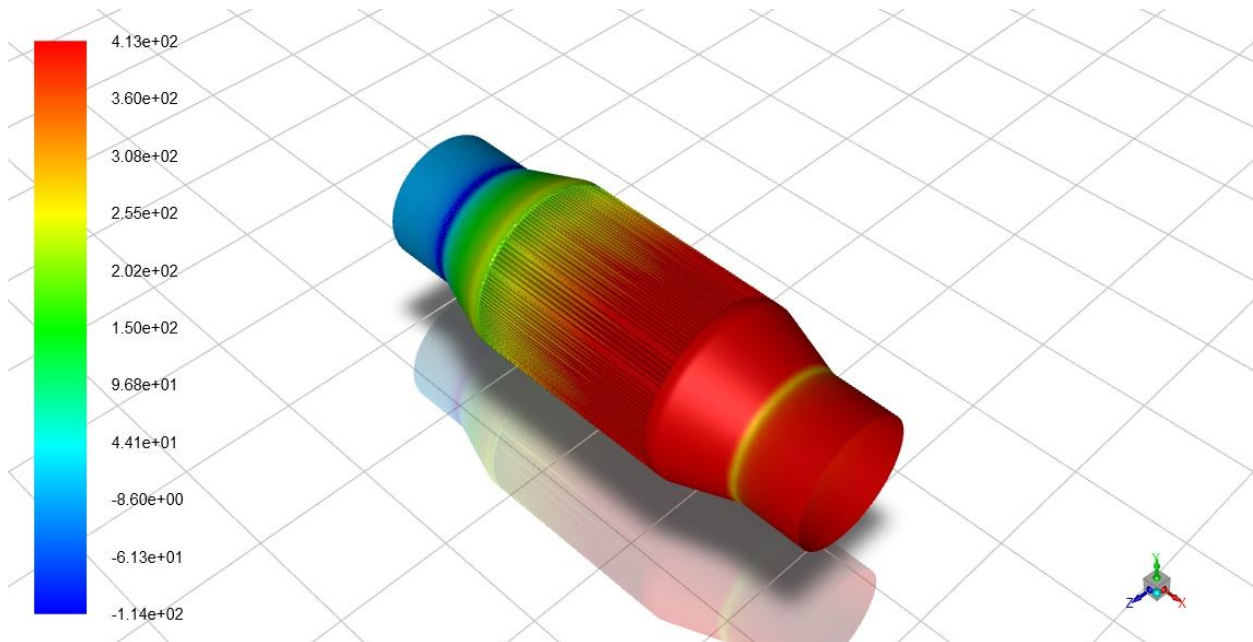


Εικόνα 62: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 200 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.12mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 200 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.16mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 610 Pascal με ελάχιστη τα -135 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομιών εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 414.61331 Pa.



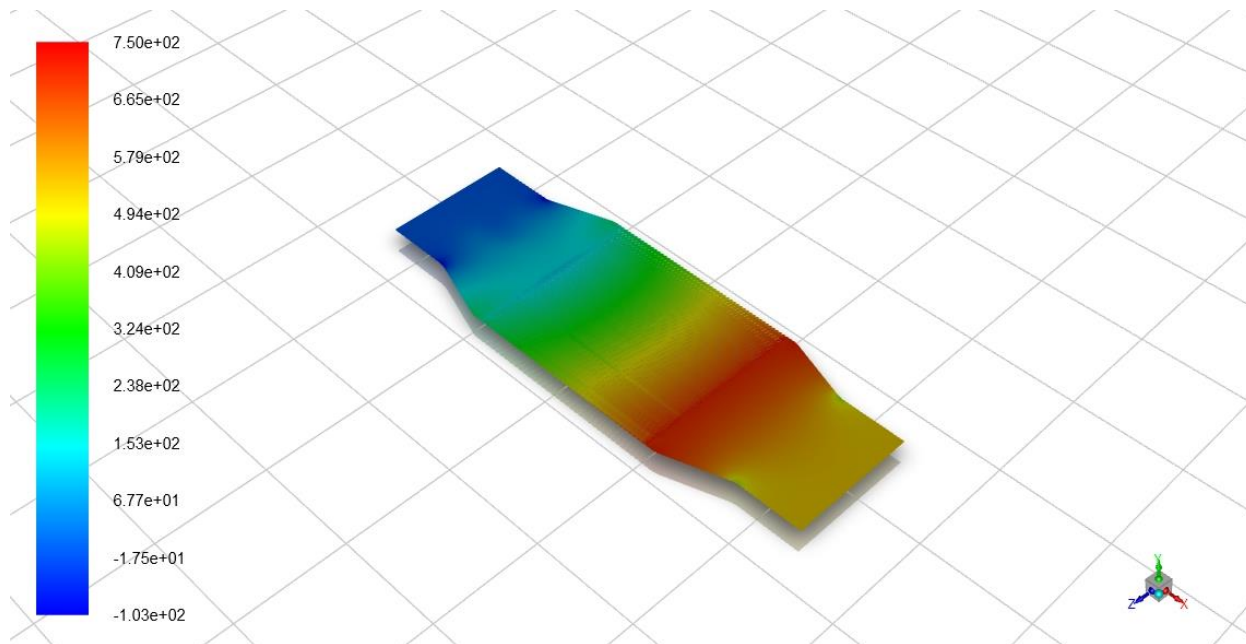
Εικόνα 63: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 200 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.12mm



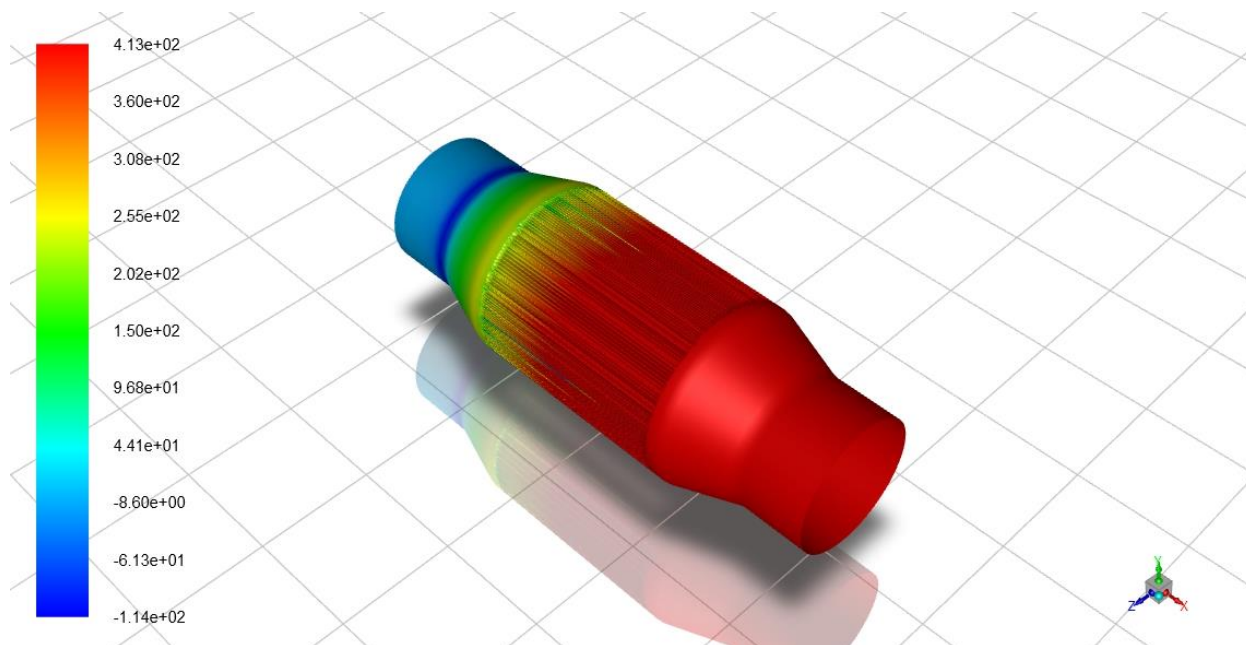
Εικόνα 64: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 200 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.16mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 400 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.05mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 750 Pascal με ελάχιστη τα -103 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε

σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυφελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομιών εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 532.39818 Pa.

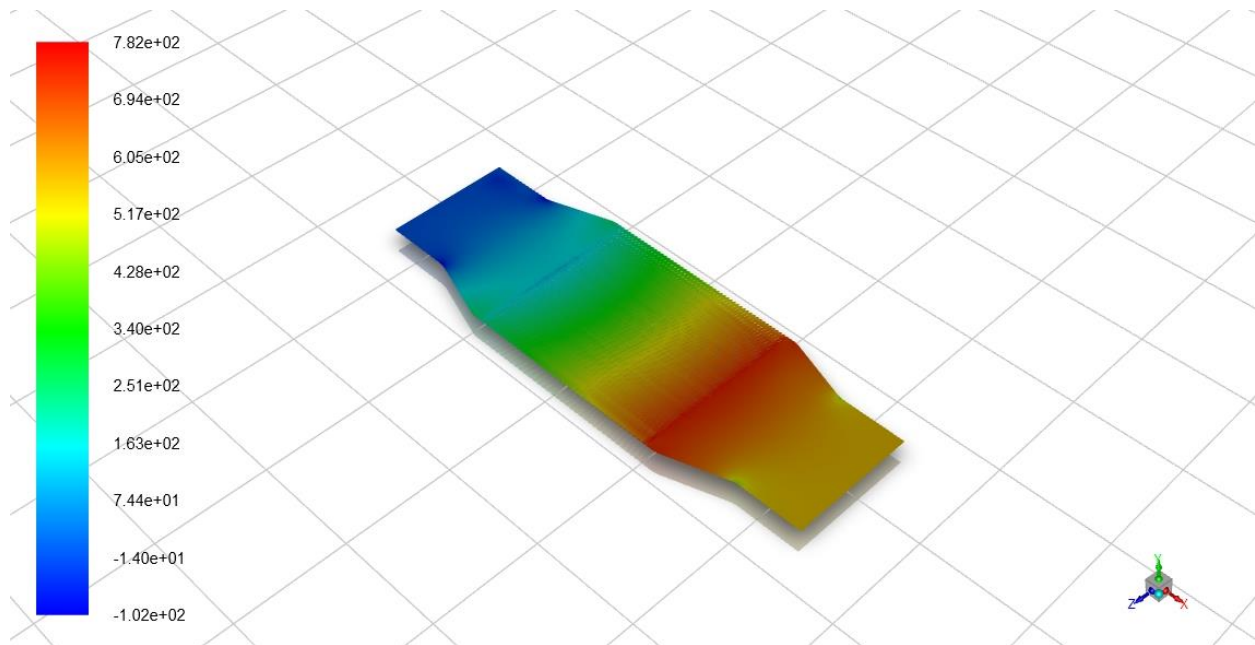


Εικόνα 65: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 400 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

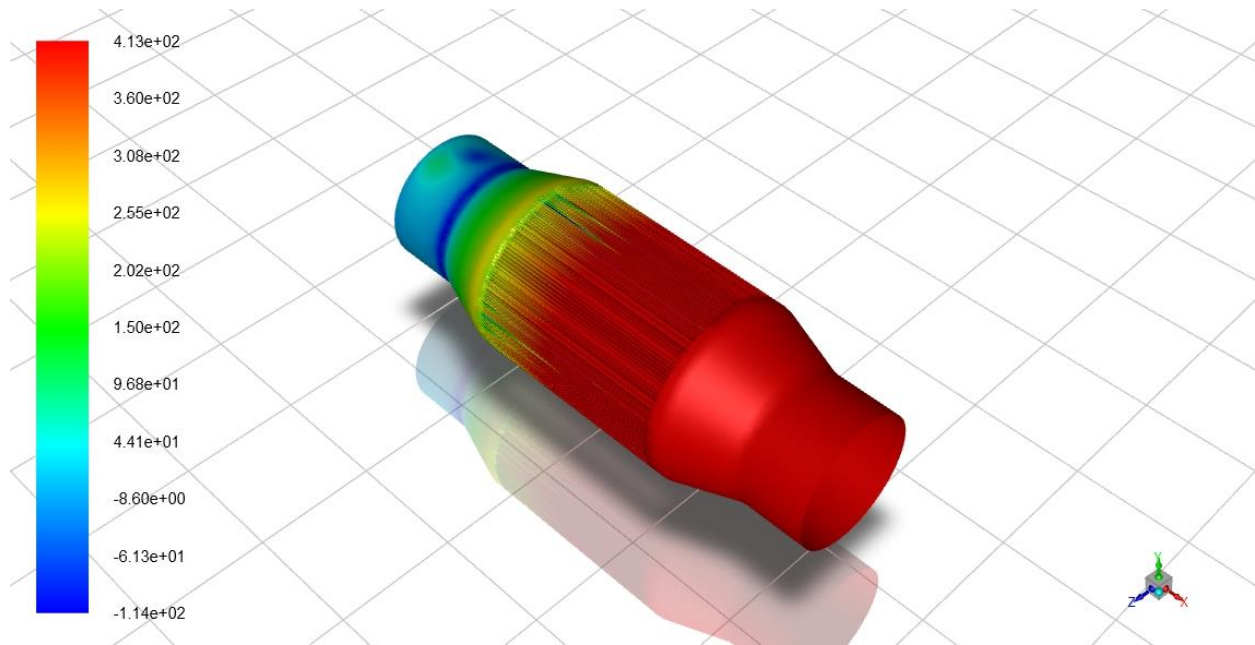


Εικόνα 66: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 400 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 400 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.06mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 782 Pascal με ελάχιστη τα -102 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομών εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 565.13606 Pa.

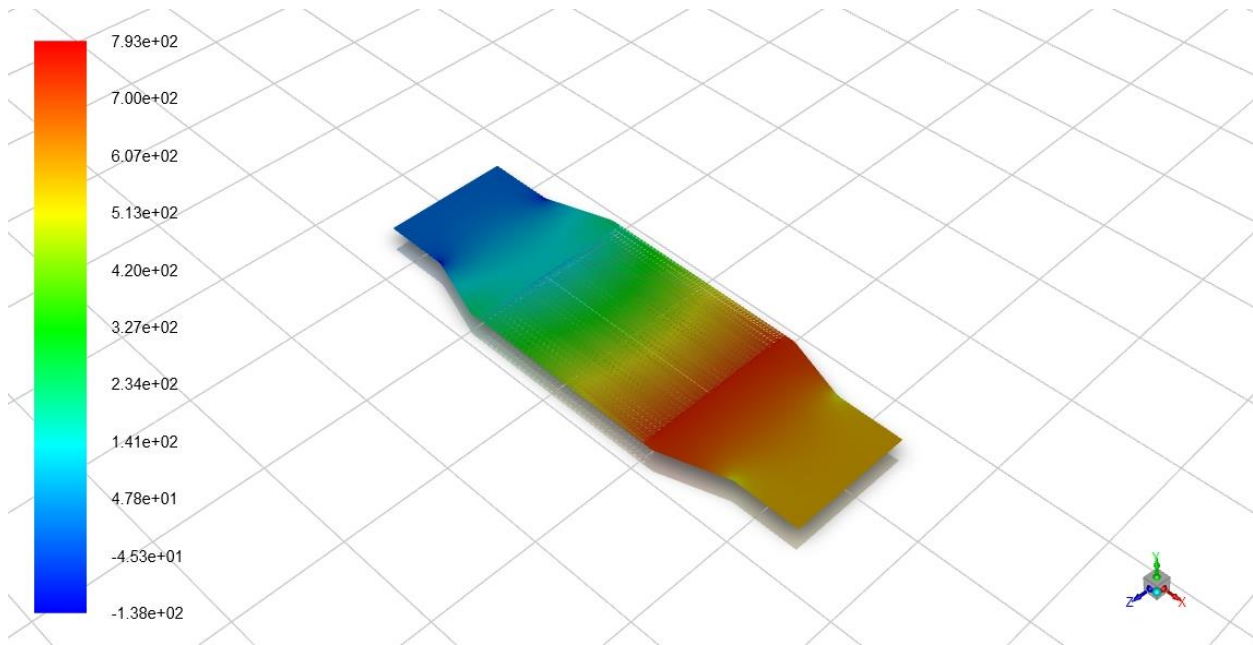


Εικόνα 67: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 400 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.06mm

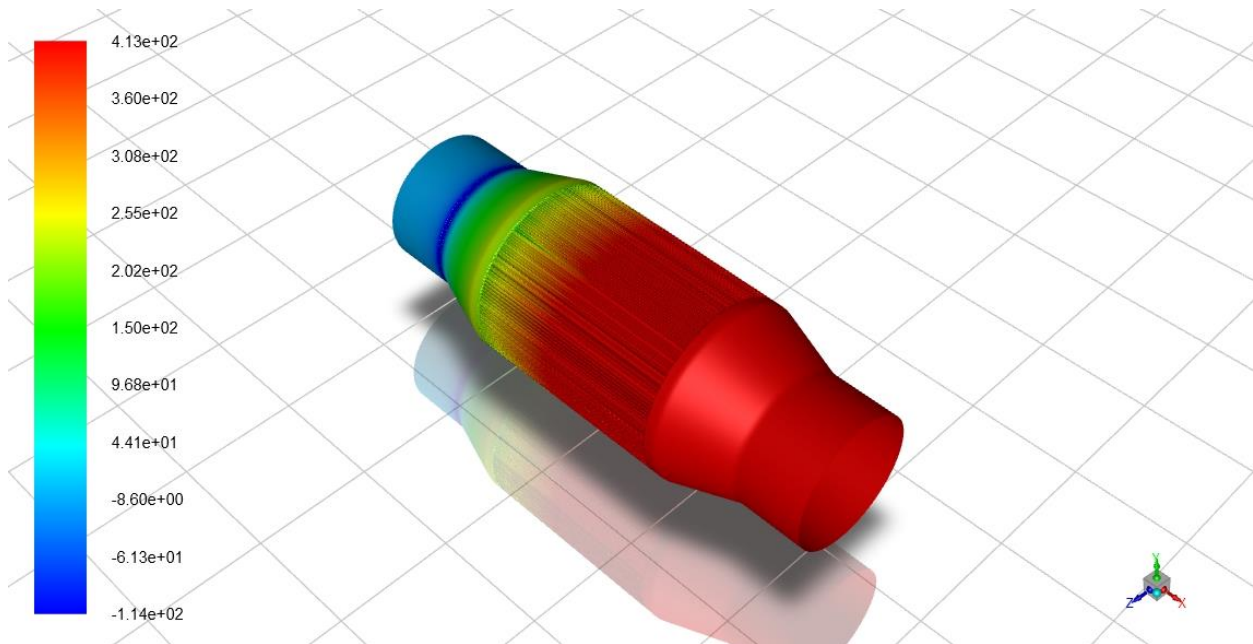


Εικόνα 68: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 400 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.06mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 400 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.08mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 793 Pascal με ελάχιστη τα -138 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομίων εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 579.29179 Pa.



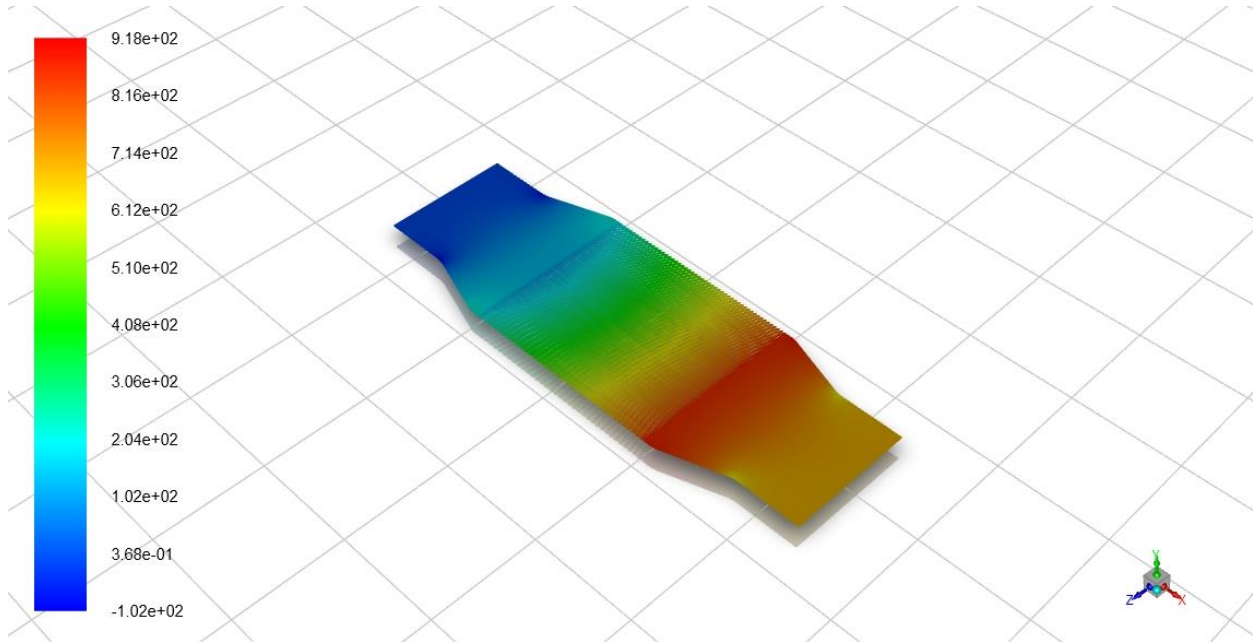
Εικόνα 69: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 400 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.08mm



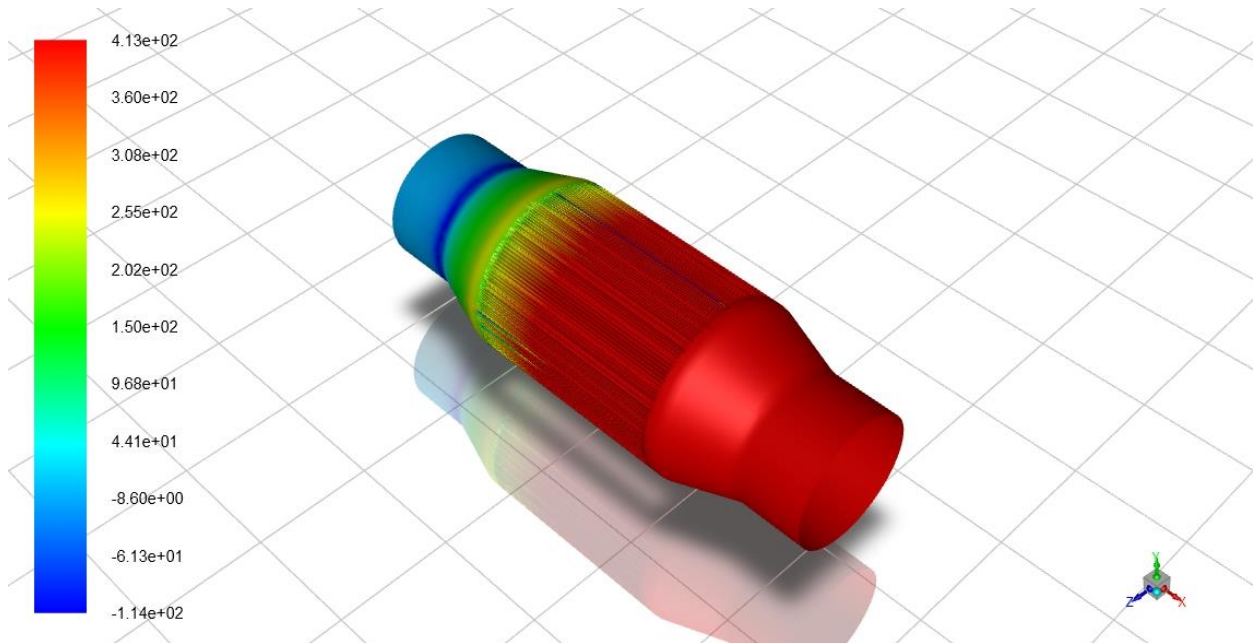
Εικόνα 70: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 400 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.08mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 400 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.12mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 918 Pascal με ελάχιστη τα -102 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε

σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυφελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομίων εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 689.21103 Pa.

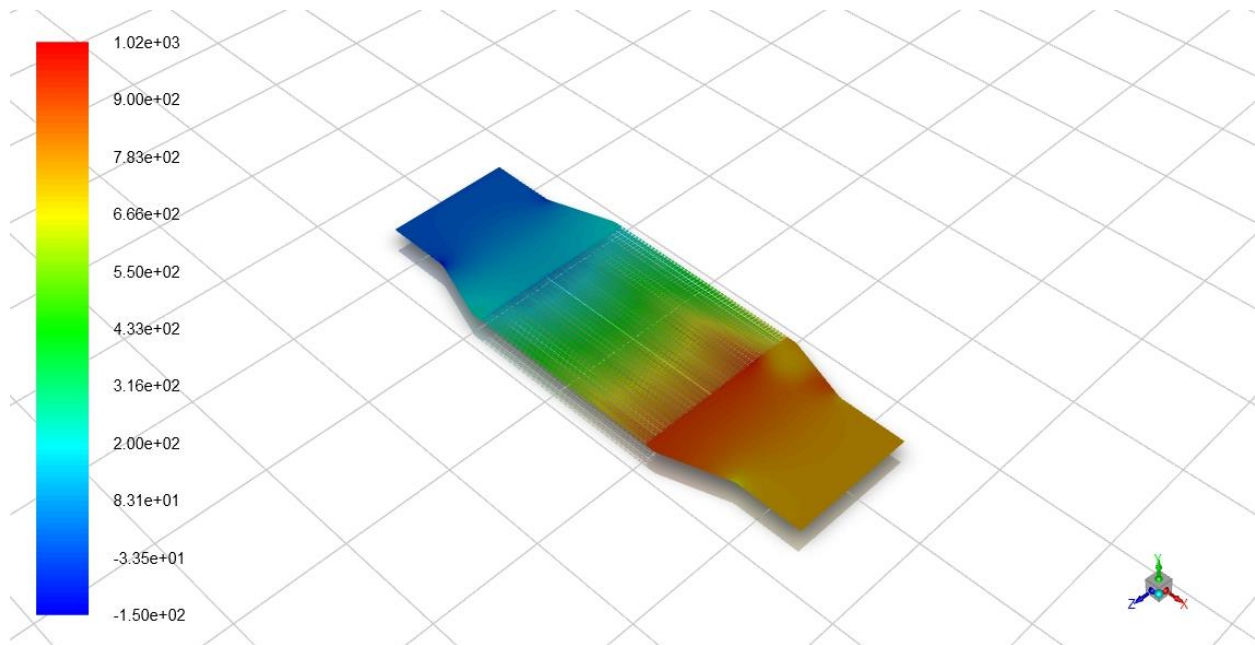


Εικόνα 71: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 400 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.12mm

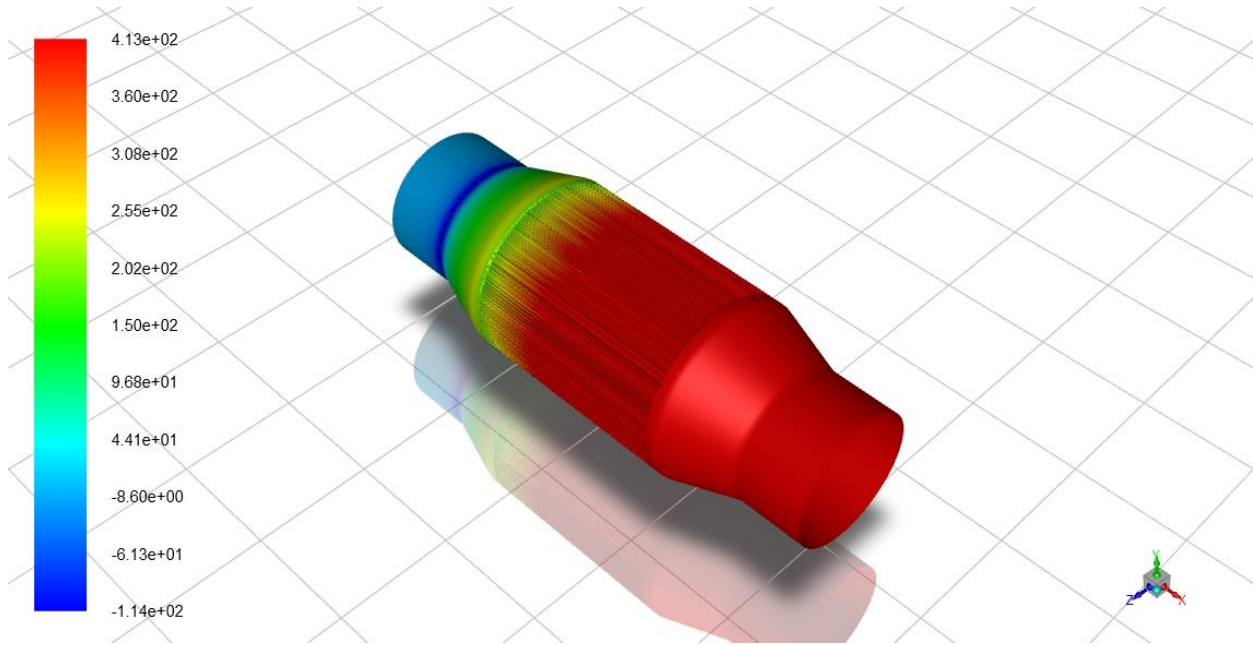


Εικόνα 72: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 400 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.12mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυφελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον καταλύτη 400 κυψελών και πάχος τοιχωμάτων 0.12mm. Η πρώτη εικόνα απεικονίζει τις πιέσεις κατά μήκος της τομής ZX του καταλύτη. Η μέγιστη πίεση είναι 1020 Pascal με ελάχιστη τα -150 Pascal. Στη δεύτερη εικόνα παρουσιάζεται η πίεση που ασκείται περιμετρικά στα τοιχώματα σε σύγκριση με τον καταλύτη 100 κυψελών και πάχους τοιχωμάτων 0.05mm. Η διαφορά πίεσης μεταξύ των στομιών εισόδου και εξόδου είναι ίση με ΔP (inlet-outlet) = 752.1667 Pa.

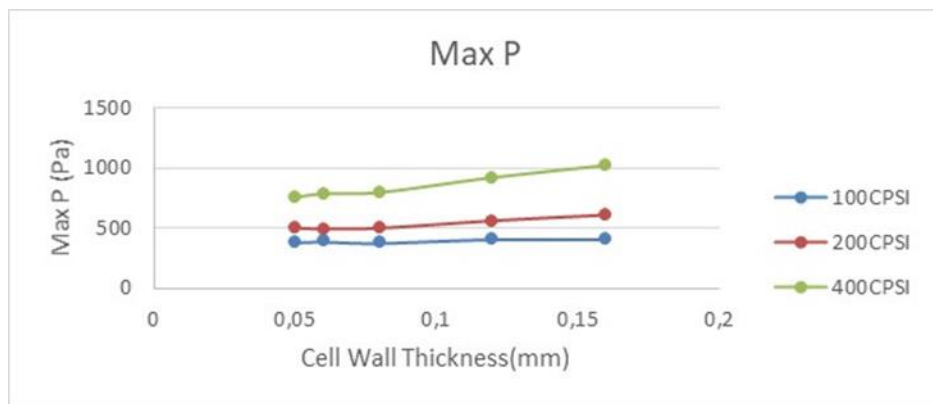


Εικόνα 73: Κατανομή πιέσεων σε τομή ZX στον καταλύτη 400 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.16mm



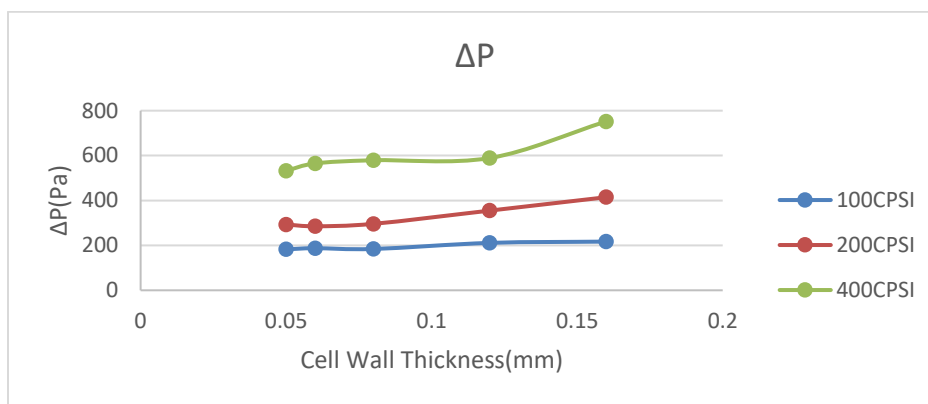
Εικόνα 74: Κατανομή πιέσεων στα τοιχώματα του καταλύτη 400 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.16mm με βάση την κλίμακα του καταλύτη 100 κυψελών με τοιχώματα πάχους 0.05mm

Στα ακόλουθα δύο διαγράμματα παρουσιάζονται συγκεντρωτικά τα αποτελέσματα για τη μέγιστη πίεση και την πτώση πίεσης για όλους τους καταλυτικούς μετατροπείς που αναλύθηκαν. Είναι εμφανές ότι το φαινόμενο της αντίθλιψης είναι κλιμακωτά εντονότερο στους πυκνότερους καταλύτες ενώ όπως μπορεί να παρατηρηθεί η αύξηση της πυκνότητας των κυψελών στον καταλύτη 100CPSI δεν προκαλεί σημαντική αύξηση του μεγέθους αυτού.



Εικόνα 75: Συγκεντρωτικά αποτελέσματα μέγιστης πίεσης

Συνεπώς, η μεταβολή των τοιχωμάτων των κυψελών φαίνεται να επηρεάζει σημαντικά τους καταλύτες με πυκνότερη δομή σε αντίθεση με τους αραιότερους καταλύτες που η αύξηση του πάχους των τοιχωμάτων των κυψελών φαίνεται να μην έχει σημαντική επιρροή.



Εικόνα 76: Συγκεντρωτικά αποτελέσματα πτώσης πίεσης

4.3 Εισαγωγή στο CHEMKIN

Το CHEMKIN είναι ένα εργαλείο λογισμικού για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων χημικής κινητικής. Χρησιμοποιείται παγκοσμίως στην καύση, στη χημική επεξεργασία, στη μικροηλεκτρονική και στην αυτοκινητοβιομηχανία, καθώς και στην ατμοσφαιρική επιστήμη. Αρχικά αναπτύχθηκε στα Sandia National Laboratories και τώρα πλέον αναπτύσσεται από μια αμερικανική εταιρεία, τη Reaction Design.

Το λογισμικό CHEMKIN επιλύει χιλιάδες συνδυασμούς αντίδρασης παρέχοντας έτσι τη δυνατότητα να αναπτυχθεί μια ολοκληρωμένη κατανόηση μιας συγκεκριμένης διαδικασίας, η οποία μπορεί να περιλαμβάνει πολλαπλά χημικά είδη, περιοχές συγκέντρωσης και θερμοκρασίες αερίου.

Το λογισμικό προσομοίωσης χημικής κινητικής επιτρέπει μια πιο αποτελεσματική από το χρόνο διερεύνηση μιας πιθανής νέας διαδικασίας σε σύγκριση με την άμεση εργαστηριακή έρευνα.

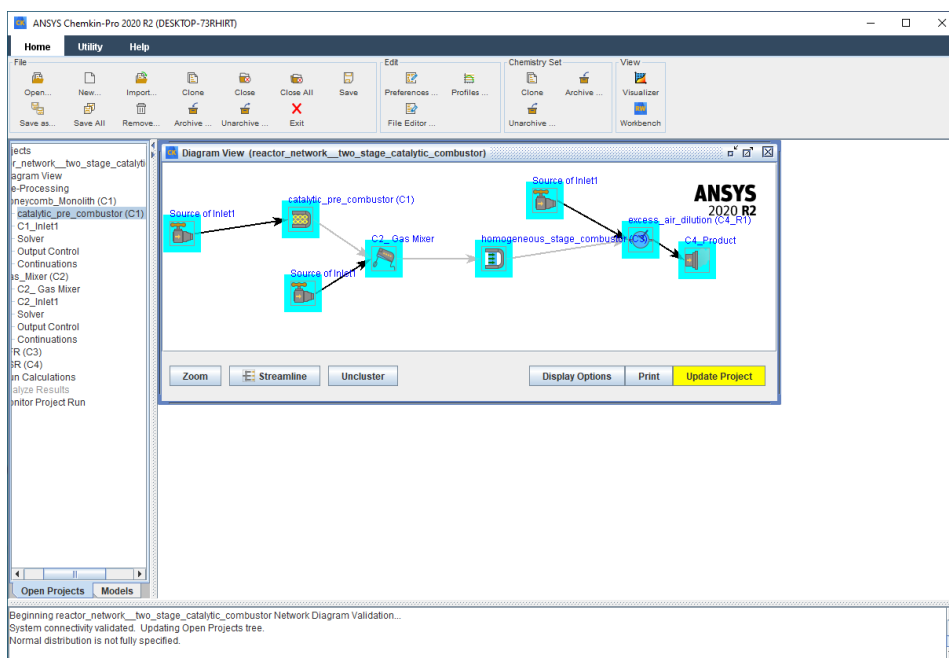
Ένας σημαντικός παράγοντας για την ανάπτυξη και χρήση του CHEMKIN είναι η τάση που υπάρχει για μείωση των ρύπων, όπως το NO_x. Καθώς αυτοί οι ρύποι ρυθμίζονται αυστηρότερα μέσω κανονισμών από οργανισμούς όπως η Υπηρεσία Προστασίας του Περιβάλλοντος των Ηνωμένων Πολιτειών και το Συμβούλιο Αεροπορικών Πόρων της

Καλιφόρνιας (CARB), για αυτό το λόγο, οι ερευνητές χρησιμοποιούν ολοένα και περισσότερο την τεχνολογία προσομοιώσεων.

Ένας περιορισμός του CHEMKIN είναι ότι γίνεται η υπόθεση ότι το πλαίσιο στο οποίο συμβαίνει η αντίδραση έχει σχετικά απλή γεωμετρία, ενώ μερικές φορές αυτό δεν υφίσταται. Για το λόγο αυτό, ένα σχετικό πρόγραμμα που ονομάζεται KINetics χρησιμοποιείται συχνά σε συνδυασμό με τα εργαλεία Computational Fluid Dynamics. Τα προγράμματα CFD είναι αποτελεσματικότερα στο να λαμβάνουν υπόψη τη γεωμετρική πολυπλοκότητα, εις βάρος της αποτελεσματικότητά τους στην ανάλυση της υποκείμενης χημείας της αντιδραστικής διαδικασίας που μελετάται.

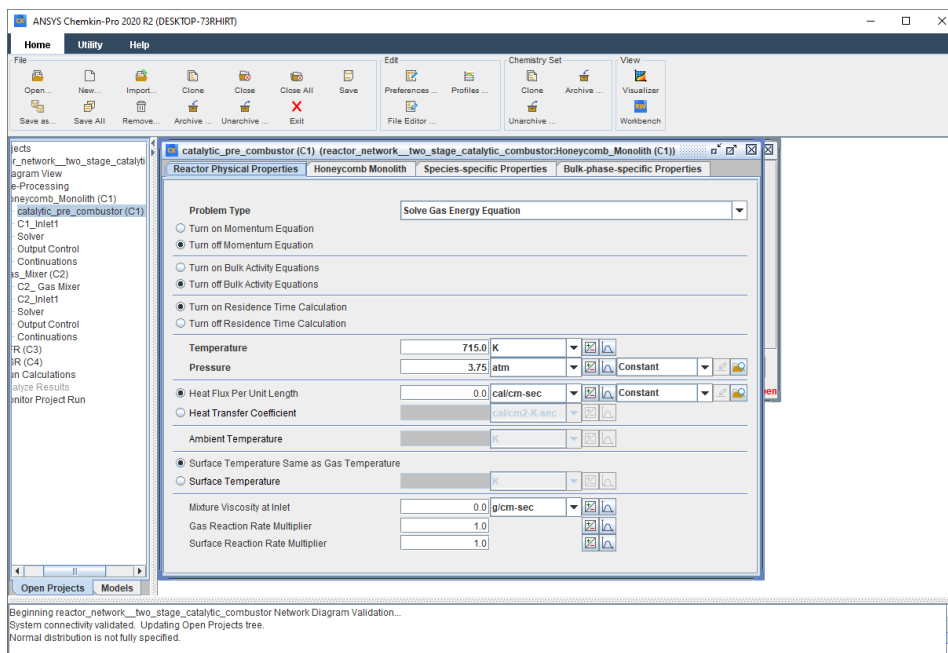
Η Reaction Design εξαγοράστηκε από την ANSYS το 2014, οπότε η Chemkin και τα σχετικά προϊόντα είναι πλέον διαθέσιμα μέσω του λογισμικού ANSYS.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα βήματα που ακολουθήθηκαν για τις αναλύσεις στο Chemkin. Αρχικά, γίνεται εκκίνηση του ANSYS Chemkin και κατασκευάζεται το κάτωθι μοντέλο

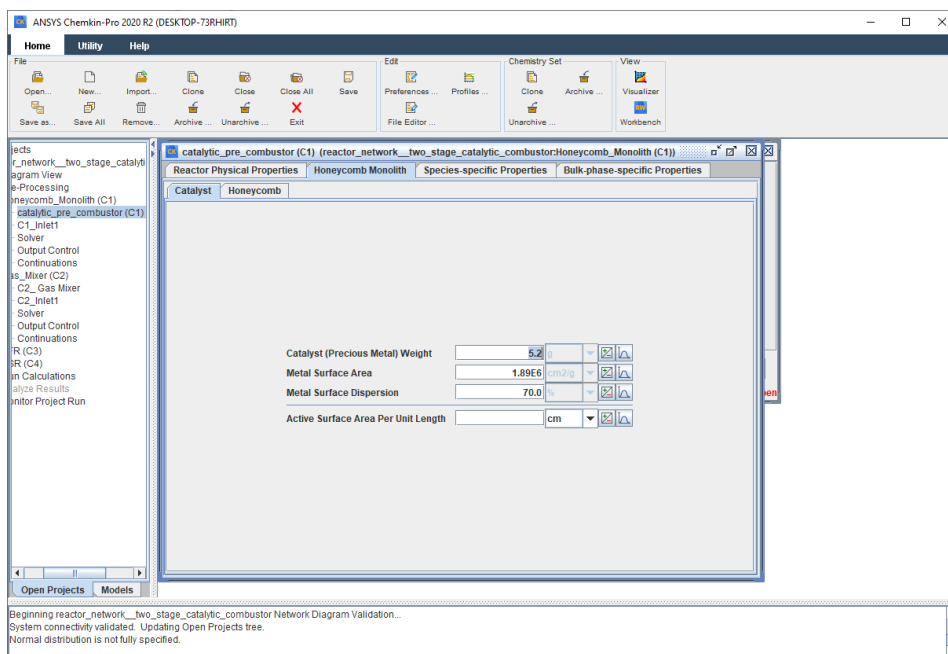


Εικόνα 77: Μοντέλο καταλυτικού μετατροπέα σε περιβάλλον ANSYS Chemkin

Επιλέγοντας το εικονίδιο «catalytic_pre_combustor» μπορούν να τροποποιηθούν οι φυσικές ιδιότητες του καταλύτη, όπως θερμοκρασία και πίεση.

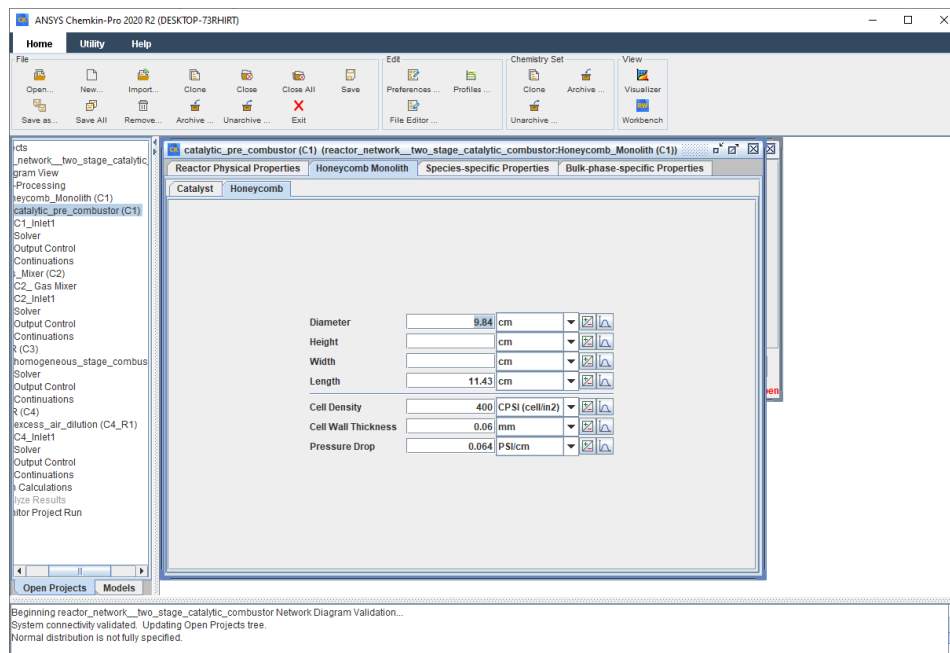


Εικόνα 78: Καρτέλα τροποποίησης φυσικών ιδιοτήτων του καταλυτικού μετατροπέα. Στην αμέσως δεξιά καρτέλα με τίτλο και «Honeycomb Monolith» και στην υποκατηγορία Catalyst, μπορούν να προσδιοριστούν οι καταλυτικές ιδιότητες του μετατροπέα, όπως το βάρος σε ευγενή μέταλλα, η επιφάνεια των μετάλλων του υποστρώματος καθώς και η διασπορά αυτών.



Εικόνα 79: Καταλυτικές ιδιότητες του υποστρώματος καταλυτικού μετατροπέα

Στην ίδια καρτέλα αλλά αυτή τη φορά στην υποκατηγορία Honeycomb, μπορούν να προσδιοριστούν οι γεωμετρικές ιδιότητες του μετατροπέα, όπως η διάμετρος, το μήκος, η πυκνότητα κυψελών, το πάχος των τοιχωμάτων και η πτώση της πίεσης.



Εικόνα 80: Γεωμετρικές ιδιότητες υποστρώματος καταλυτικού μετατροπέα

4.4 Αποτελέσματα Αναλύσεων στο CHEMKIN

Σύμφωνα με τις αναλύσεις που προσομοιώθηκαν στο ANSYS Fluent, αντιστοίχως θα γίνει ανάλυση με παρεμφερή δεδομένα και σαν καύσιμο το μεθάνιο, ώστε να γίνει σύγκριση των παραγόμενων ρύπων και θερμοκρασιών, μεταξύ των διαφορετικών γεωμετριών των καταλυτών. Τρεις διαφορετικές πυκνότητες καταλυτών και πέντε διαφορετικά πάχη τοιχωμάτων έχουν επιλεγεί προς ανάλυση, όπως ακριβώς και στις προηγούμενες αναλύσεις. Ως ταχύτητα αερίων έχει επιλεγεί ίδια με αυτή του ANSYS Fluent (22.6m/s) και θερμοκρασία καυσαερίων 715K, δίνοντας έτσι μια αυξημένη θερμοκρασία εξαγωγής. Ο ρυθμός ροής μάζας των καυσαερίων (mass flow rate) είναι 0.17187kg/s εκ του οποίου το 21.5% αντιστοιχεί σε περίσσεια αέρα (36.95 g/s). Σαν περίσσεια καυσίμου, έχει επιλεγεί η τιμή 1.58 g/s. Σε όλες τις περιπτώσεις, το ενδιάμεσο στρώμα, λαμβάνει τη τιμή 189 m²/g. Ως ποσότητα σε ευγενή μέταλλα, έχει επιλεγεί η τιμή 5.2g για τον καταλύτη των 400 κυψελών και τοιχωμάτων 0.16mm και για τους υπόλοιπους έχει γίνει αναγωγή βάσει της ενεργούς επιφάνειας. Ο καταλύτης έχει διατομή 98.4mm και

μήκος 114.3mm. Ως πίεση έχει επιλεγεί η τιμή 101325 Pascal και η πτώση πίεσης ανά εκατοστό έχει επιλεγεί σύμφωνα με τις αναλύσεις στο Fluent, για την εκάστοτε περίπτωση.

Για τον καταλύτη 100 κυψελών με πάχος τοιχωμάτων 0.05mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=182.4 \text{ Pa}$, δηλαδή $0.02646 \text{ PSI} / 11.43 \text{ cm} = 0.002315 \text{ PSI/cm}$ πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 1340212.19 mm^2 αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 2.8966g.

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

```

RESIDENCE TIME          2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE          1.1906E+02 GM/SEC
PRESSURE                 0.9982 ATM
MASS DENSITY            2.2911E-04 GM/CM^3
VOLUME                  1039. CM^3
TOTAL MASS              0.2381 G
TOTAL SURFACE AREA      0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO 0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION 1.6786E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1141.1554 K
TEMPERATURE             1503.7275 K
SURF TEMP, CATALYST     1503.7275 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST    0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION, CATALYST 0.0000E+00 CAL/S/CM^2

```

EXIT GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2	=	2.8651E-004	H	=	1.0638E-004	O	=	5.8323E-004
O2	=	1.3116E-001	OH	=	1.1155E-003	H2O	=	7.0937E-002
NO2	=	2.0498E-005	H2O2	=	4.4378E-007	C	=	2.0546E-012
CH	=	7.4105E-010	CH2	=	2.3391E-007	CH2(S)	=	2.6462E-008
CH3	=	1.8754E-005	CH4	=	2.0907E-004	CO	=	2.9860E-003
CO2	=	3.2921E-002	HCO	=	3.1550E-007	CH2O	=	2.0334E-005
CH2OH	=	1.9205E-008	CH3O	=	2.4622E-008	CH3OH	=	1.2013E-006
C2H	=	1.4470E-012	C2H2	=	4.3585E-009	C2H3	=	5.1818E-010
C2H4	=	7.8542E-008	C2H5	=	5.5498E-009	C2H6	=	4.0243E-008
HCCO	=	9.7960E-010	CH2CO	=	6.6102E-008	HCCOH	=	1.1941E-010
N	=	1.4157E-011	NH	=	8.7373E-011	NH2	=	1.2329E-011
NH3	=	1.0496E-011	NMH	=	1.2334E-010	NO	=	4.5975E-007
NO2	=	2.0952E-009	N2O	=	6.1174E-007	HNO	=	9.0384E-011
CN	=	2.3360E-013	HCN	=	1.7524E-009	H2CN	=	2.4846E-014
HCNN	=	2.1732E-012	HCNO	=	3.0398E-010	HOCN	=	1.6995E-011
HNCO	=	1.5999E-009	NCO	=	8.0320E-011	N2	=	7.5963E-001
AR	=	0.0000E+000	C3H7	=	2.3164E-013	C3H8	=	8.5676E-012
CH2CHO	=	4.1323E-010	CH3CHO	=	3.2872E-008			

Volatile Organic Compounds (ppm): 250.4
Unburned Hydrocarbons (ppm): 228.3

CO (ppmvd): 3214.
NO (ppmvd): 0.4949
NOx (ppmvd): 1.156
CO (ppmvd 15% O2): 2802.
NO (ppmvd 15% O2): 0.4314
NOx (ppmvd 15% O2): 1.007

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE

Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(S)	=	9.0909E-002	H(S)	=	9.0909E-002	H2O(S)	=	9.0909E-002
OH(S)	=	9.0909E-002	CO(S)	=	9.0909E-002	CO2(S)	=	9.0909E-002
CH3(S)	=	9.0909E-002	CH2(S)s	=	9.0909E-002	CH(S)	=	9.0909E-002
C(S)	=	9.0909E-002	O(S)	=	9.0909E-002			

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK

Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name	Mole_frac	Activity	Density (gm/cm^3)	-----Growth Rate-----			
				mole/(cm^2*sec)	gm/(cm^2*sec)	cm/sec	(microns/hr)
PT(B)	= 1.000	1.000	-1.000	0.000	0.000	0.000	0.000

=====
TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

Εικόνα 81: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 100CSI, 0.05mm

Για τον καταλύτη 100 κυφελών με πάχος τοιχωμάτων 0.06mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=187.5$ Pa, δηλαδή 0.02646 PSI / 11.43 cm = 0.002315 PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 1335198.95mm^2 αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 2.8857g .

```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME          2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE          1.1841E+02 GM/SEC
PRESSURE                0.9981 ATM
MASS DENSITY            2.2879E-04 GM/CM^3
VOLUME                  1035. CM^3
TOTAL MASS              0.2368 G
TOTAL SURFACE AREA      0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO 0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION 1.6861E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1140.9324 K
TEMPERATURE             1505.6541 K
SURF TEMP, CATALYST     1505.6541 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST     0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION,
CATALYST                 0.0000E+00 CAL/S/CM^2

EXIT  GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2      = 2.8796E-004    H      = 1.0760E-004    O      = 5.8865E-004
O2      = 1.3095E-001    OH     = 1.1269E-003    H2O    = 7.1117E-002
HO2     = 2.0393E-005    H2O2  = 4.4168E-007    C      = 2.1248E-012
CH      = 7.5666E-010    CH2   = 2.3564E-007    CH2(S) = 2.6655E-008
CH3     = 1.8714E-005    CH4   = 2.0756E-004    CO     = 2.9794E-003
CO2     = 3.3022E-002    HCO   = 3.1731E-007    CH2O  = 2.0238E-005
CH2OH   = 1.9351E-008    CH3O  = 2.4433E-008    CH3OH  = 1.1879E-006
C2H     = 1.4639E-012    C2H2  = 4.3304E-009    C2H3  = 5.1648E-010
C2H4    = 7.7228E-008    C2H5  = 5.4667E-009    C2H6  = 3.9404E-008
HCCO    = 9.7657E-010    CH2CO = 6.5116E-008    HCCOH  = 1.1910E-010
N        = 1.4564E-011    NH     = 8.8953E-011    NH2    = 1.2622E-011
NH3     = 1.0727E-011    NNH   = 1.2503E-010    NO     = 4.7112E-007
NO2     = 2.1252E-009    N2O   = 6.1424E-007    HNO    = 9.1995E-011
CN      = 2.4176E-013    HCN   = 1.7820E-009    H2CN  = 2.5341E-014
HCNN    = 2.2065E-012    HCN0  = 3.9197E-010    HOCN  = 1.6660E-011
HMCO    = 1.6291E-009    NCO   = 8.2109E-011    N2     = 7.5955E-001
AR      = 0.0000E+000    C3H7  = 2.2521E-013    C3H8  = 8.2451E-012
CH2CHO  = 4.0725E-010    CH3CHO = 3.2331E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 248.8
Unburned Hydrocarbons (ppm): 226.8

CO      (ppmvd): 3208.
NO      (ppmvd): 0.5072
NOx     (ppmvd): 1.171
CO      (ppmvd 15% O2): 2788.
NO      (ppmvd 15% O2): 0.4409
NOx     (ppmvd 15% O2): 1.018

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(S)   = 9.0909E-002    H(S)   = 9.0909E-002    H2O(S) = 9.0909E-002
OH(S)   = 9.0909E-002    CO(S)  = 9.0909E-002    CO2(S) = 9.0909E-002
CH3(S)  = 9.0909E-002    CH2(S)s = 9.0909E-002    CH(S)  = 9.0909E-002
C(S)    = 9.0909E-002    O(S)   = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec (microns/hr)

PT(B)  =  1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
=====

TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

```

Εικόνα 82: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 100CSI, 0.06mm

Για τον καταλύτη 100 κυφελών με πάχος τοιχωμάτων 0.08mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=184.1$ Pa, δηλαδή 0.02646 PSI / 11.43 cm = 1325170.83 PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 1335198.95mm^2 αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 2.8641g .

```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME                2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE                1.1713E+02 GM/SEC
PRESSURE                      0.9982 ATM
MASS DENSITY                  2.2820E-04 GM/CM^3
VOLUME                        1027. CM^3
TOTAL MASS                    0.2343 G
TOTAL SURFACE AREA            0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO 0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION     1.7016E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1140.4702 K
TEMPERATURE                   1509.5359 K
SURF TEMP, CATALYST           1509.5359 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST           0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION,
CATALYST                       0.0000E+00 CAL/S/CM^2

EXIT  GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2      = 2.9091E-004      H      = 1.1006E-004      O      = 5.9951E-004
O2      = 1.3051E-001      OH     = 1.1499E-003      H2O    = 7.1482E-002
H2O     = 2.0183E-005      H2O2   = 4.3752E-007      C      = 2.2714E-012
CH      = 7.8873E-010      CH2    = 2.3914E-007      CH2(S) = 2.7045E-008
CH3     = 1.8634E-005      CH4    = 2.0457E-004      CO     = 2.9662E-003
CO2     = 3.3225E-002      HCO    = 3.2092E-007      CH2O   = 2.0046E-005
CH2OH   = 1.9648E-008      CH3O   = 2.4064E-008      CH3OH  = 1.1616E-006
C2H     = 1.4981E-012      C2H2   = 4.2744E-009      C2H3   = 5.1290E-010
C2H4    = 7.4647E-008      C2H5   = 5.3006E-009      C2H6   = 3.7749E-008
HCCO    = 9.7024E-010      CH2CO  = 6.3172E-008      HCCOH  = 1.1864E-010
N        = 1.5411E-011      NH     = 9.2175E-011      NH2    = 1.3184E-011
NH3     = 1.1143E-011      NNH    = 1.2848E-010      NO     = 4.9470E-007
NO2     = 2.1729E-009      N2O    = 6.1920E-007      HNO    = 9.5290E-011
CN       = 2.5884E-013      HCN    = 1.8386E-009      H2CN   = 2.6354E-014
HCNN    = 2.2746E-012      HCNO   = 4.0853E-010      HOCN   = 2.0075E-011
HMCO    = 1.6863E-009      NCO    = 8.5748E-011      N2     = 7.5940E-001
AR       = 0.0000E+000      C3H7   = 2.1274E-013      C3H8   = 7.6309E-012
CH2CHO  = 3.9538E-010      CH3CHO = 3.1252E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 245.5
Unburned Hydrocarbons (ppm): 223.7

CO      (ppmvd): 3195.
NO      (ppmvd): 0.5328
NOx     (ppmvd): 1.202
CO      (ppmvd 15% O2): 2760.
NO      (ppmvd 15% O2): 0.4603
NOx     (ppmvd 15% O2): 1.039

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(S)   = 9.0909E-002      H(S)   = 9.0909E-002      H2O(S) = 9.0909E-002
OH(S)   = 9.0909E-002      CO(S)  = 9.0909E-002      CO2(S) = 9.0909E-002
CH3(S)  = 9.0909E-002      CH2(S)s = 9.0909E-002      CH(S)  = 9.0909E-002
C(S)    = 9.0909E-002      O(S)   = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec (microns/hr)

PT(B)  =  1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
=====

TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

```

Εικόνα 83: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 100CSI, 0.08mm

Για τον καταλύτη 100 κυφελών με πάχος τοιχωμάτων 0.12mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=211.2$ Pa, δηλαδή 0.03063 PSI / 11.43 cm = 0.002679 PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 1305108.01mm² αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 2.8207g.

```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME          2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE          1.1460E+02 GM/SEC
PRESSURE                0.9982 ATM
MASS DENSITY            2.2697E-04 GM/CM^3
VOLUME                  1010. CM^3
TOTAL MASS              0.2292 G
TOTAL SURFACE AREA      0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO 0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION 1.7328E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1139.4761 K
TEMPERATURE             1517.3982 K
SURF TEMP, CATALYST     1517.3982 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST     0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION, CATALYST 0.0000E+00 CAL/S/CM^2

EXIT GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2          = 2.9725E-004      H          = 1.1518E-004      O          = 6.2180E-004
O2          = 1.2962E-001      OH         = 1.1974E-003      H2O        = 7.2226E-002
HO2         = 1.9767E-005      H2O2       = 4.2930E-007      C          = 2.5986E-012
CH          = 8.5754E-010      CH2        = 2.4634E-007      CH2(S)     = 2.7847E-008
CH3         = 1.8479E-005      CH4        = 1.9874E-004      CO         = 2.9410E-003
CO2         = 3.3639E-002      HCO        = 3.2831E-007      CH2O       = 1.9672E-005
CH2OH      = 2.0264E-008      CH3O       = 2.3352E-008      CH3OH      = 1.1106E-006
C2H        = 1.5716E-012      C2H2       = 4.1716E-009      C2H3       = 5.0652E-010
C2H4       = 6.9837E-008      C2H5       = 4.9885E-009      C2H6       = 3.4683E-008
HCCO       = 9.5902E-010      CH2CO      = 5.9527E-008      HCCOH      = 1.1764E-010
N          = 1.7268E-011      NH         = 9.8968E-011      NH2        = 1.4408E-011
NH3        = 1.1981E-011      NHH        = 1.3568E-010      NO         = 5.4535E-007
NO2        = 2.2586E-009      N2O        = 6.2851E-007      HNO        = 1.0222E-010
CN         = 2.9752E-013      HCN        = 1.9742E-009      H2CN       = 2.8544E-014
HCNN       = 2.4176E-012      HCNO       = 4.4278E-010      HOCN       = 2.0300E-011
HNCO       = 1.0094E-009      NCO        = 9.3608E-011      N2         = 7.5908E-001
AR         = 0.0000E+000      C3H7       = 1.9002E-013      C3H8       = 6.5401E-012
CH2CHO     = 3.7313E-010      CH3CHO     = 2.9226E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 239.1
Unburned Hydrocarbons (ppm): 217.7

CO          (ppmvd): 3170.
NO          (ppmvd): 0.5878
NOx         (ppmvd): 1.268
CO          (ppmvd 15% O2): 2706.
NO          (ppmvd 15% O2): 0.5017
NOx         (ppmvd 15% O2): 1.082

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(S)      = 9.0909E-002      H(S)       = 9.0909E-002      H2O(S)     = 9.0909E-002
OH(S)      = 9.0909E-002      CO(S)      = 9.0909E-002      CO2(S)     = 9.0909E-002
CH3(S)     = 9.0909E-002      CH2(S)s    = 9.0909E-002      CH(S)      = 9.0909E-002
C(S)       = 9.0909E-002      O(S)       = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec (microns/hr)

PT(B) = 1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
=====

TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

```

Εικόνα 84: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 100CSI, 0.12mm

Για τον καταλύτη 100 κυφελών με πάχος τοιχωμάτων 0.16mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=216.9$ Pa, δηλαδή 0.03145 PSI / 11.43 cm = 0.002752 PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 1285036.44mm² αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 2.7774g.

```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME          2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE          1.1210E+02 GM/SEC
PRESSURE                0.9979 ATM
MASS DENSITY            2.2566E-04 GM/CM^3
VOLUME                  993.5 CM^3
TOTAL MASS              0.2242 G
TOTAL SURFACE AREA      0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO 0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION 1.7639E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1138.4805 K
TEMPERATURE             1525.4566 K
SURF TEMP, CATALYST     1525.4566 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST    0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION, CATALYST 0.0000E+00 CAL/S/CM^2

EXIT  GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2      = 3.0421E-004      H      = 1.2065E-004      O      = 6.4515E-004
O2      = 1.2870E-001      OH     = 1.2473E-003      H2O    = 7.2988E-002
H2O     = 1.9350E-005      H2O2   = 4.2110E-007      C      = 2.9805E-012
CH      = 9.3368E-010      CH2    = 2.5387E-007      CH2(S) = 2.8686E-008
CH3     = 1.8327E-005      CH4    = 1.9303E-004      CO     = 2.9169E-003
CO2     = 3.4061E-002      HCO    = 3.3598E-007      CH2O   = 1.9304E-005
CH2OH   = 2.0912E-008      CH3O   = 2.2662E-008      CH3OH  = 1.0608E-006
C2H     = 1.6548E-012      C2H2   = 4.0830E-009      C2H3   = 5.0159E-010
C2H4    = 6.5491E-008      C2H5   = 4.7062E-009      C2H6   = 3.1947E-008
HCCO    = 9.5044E-010      CH2CO  = 5.6207E-008      HCCOH  = 1.1693E-010
N        = 1.9381E-011      NH     = 1.0633E-010      NH2    = 1.5824E-011
NH3     = 1.3106E-011      NNH    = 1.4340E-010      NO     = 6.0144E-007
NO2     = 2.3350E-009      N2O    = 6.3694E-007      HNO    = 1.0972E-010
CN      = 3.4168E-013      HCN    = 2.1044E-009      H2CN   = 3.0932E-014
HCNN    = 2.5706E-012      HCNCO  = 4.7908E-010      HOCN   = 1.9791E-011
HNCO    = 1.9426E-009      NCO    = 1.0228E-010      N2     = 7.5876E-001
AR      = 0.0000E+000      C3H7   = 1.7006E-013      C3HB   = 5.6106E-012
CH2CHO  = 3.5296E-010      CH3CHO = 2.7394E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 232.8
Unburned Hydrocarbons (ppm): 211.9

CO      (ppmvd): 3147.
NO      (ppmvd): 0.6488
NOx     (ppmvd): 1.338
CO      (ppmvd 15% O2): 2653.
NO      (ppmvd 15% O2): 0.5470
NOx     (ppmvd 15% O2): 1.128

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(S)   = 9.0909E-002      H(S)   = 9.0909E-002      H2O(S) = 9.0909E-002
OH(S)   = 9.0909E-002      CO(S)  = 9.0909E-002      CO2(S) = 9.0909E-002
CH3(S)  = 9.0909E-002      CH2(S)s = 9.0909E-002      CH(S)  = 9.0909E-002
C(S)    = 9.0909E-002      O(S)   = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec  (microns/hr)

PT(B)  =  1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
=====

TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

```

Εικόνα 85: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 100CSI, 0.16mm

Για τον καταλύτη 200 κυφελών με πάχος τοιχωμάτων 0.05mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=292.9$ Pa, δηλαδή 0.04247 PSI / 11.43 cm = 0.003716 PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 1881477.49mm² αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 4.0664g.

```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME          2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE          1.1773E+02 GM/SEC
PRESSURE                0.9971 ATM
MASS DENSITY            2.2826E-04 GM/CM^3
VOLUME                  1032. CM^3
TOTAL MASS              0.2355 G
TOTAL SURFACE AREA      0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO 0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION 1.6927E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1140.4277 K
TEMPERATURE             1507.5194 K
SURF TEMP, CATALYST     1507.5194 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST     0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION, CATALYST 0.0000E+00 CAL/S/CM^2

EXIT  GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2      = 2.8983E-004    H      = 1.0906E-004    O      = 5.9484E-004
O2      = 1.3071E-001    OH     = 1.1391E-003    H2O    = 7.1311E-002
H2O     = 2.0293E-005    H2O2   = 4.3975E-007    C      = 2.2081E-012
CH      = 7.7470E-010    CH2    = 2.3765E-007    CH2(S) = 2.6879E-008
CH3     = 1.8681E-005    CH4    = 2.0621E-004    CO     = 2.9751E-003
CO2     = 3.3127E-002    HCO    = 3.1960E-007    CH2O   = 2.0153E-005
CH2OH   = 1.9518E-008    CH3O   = 2.4260E-008    CH3OH  = 1.1743E-006
C2H     = 1.4485E-012    C2H2   = 4.2064E-009    C2H3   = 5.0343E-010
C2H4    = 7.4214E-008    C2H5   = 5.2364E-009    C2H6   = 3.7369E-008
HCCO    = 9.5419E-010    CH2CO  = 6.2831E-008    HCCOH  = 1.1595E-010
N       = 1.5012E-011    NH     = 9.0658E-011    NH2    = 1.2925E-011
NH3     = 1.0958E-011    NNH    = 1.2687E-010    NO     = 4.8277E-007
NO2     = 2.1518E-009    N2O    = 6.1594E-007    HNO    = 9.3677E-011
CN      = 2.5064E-013    HCN    = 1.8143E-009    H2CN   = 2.5897E-014
HCNN    = 2.2451E-012    HCNO   = 3.9965E-010    HOCN   = 1.6319E-011
HNCO    = 1.6589E-009    NCO    = 8.3966E-011    N2     = 7.5947E-001
AR      = 0.0000E+000    C3H7   = 2.1237E-013    C3H8   = 7.6916E-012
CH2CHO  = 3.9236E-010    CH3CHO = 3.0934E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 247.3
Unburned Hydrocarbons (ppm): 225.4

CO      (ppmvd): 3204.
NO      (ppmvd): 0.5198
NOx     (ppmvd): 1.185
CO      (ppmvd 15% O2): 2776.
NO      (ppmvd 15% O2): 0.4504
NOx     (ppmvd 15% O2): 1.027

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(S)   = 9.0909E-002    H(S)   = 9.0909E-002    H2O(S) = 9.0909E-002
OH(S)   = 9.0909E-002    CO(S)  = 9.0909E-002    CO2(S) = 9.0909E-002
CH3(S)  = 9.0909E-002    CH2(S) = 9.0909E-002    CH(S)  = 9.0909E-002
C(S)    = 9.0909E-002    O(S)   = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec (microns/hr)

PT(B)  =  1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
=====

TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

```

Εικόνα 86: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 200CSI, 0.05mm

Για τον καταλύτη 200 κυψελών με πάχος τοιχωμάτων 0.06mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=285.3$ Pa, δηλαδή 0.04139 PSI / 11.43 cm = 0.003621 PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 1871254.55mm^2 αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 4.0443g .

```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME                2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE                 1.1682E+02 GM/SEC
PRESSURE                       0.9972 ATM
MASS DENSITY                   2.2785E-04 GM/CM^3
VOLUME                          1025. CM^3
TOTAL MASS                      0.2336 G
TOTAL SURFACE AREA              0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO  0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION       1.7038E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1)  715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1))  1140.1134 K
TEMPERATURE                    1510.2892 K
SURF TEMP, CATALYST            1510.2892 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST            0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION,
CATALYST                        0.0000E+00 CAL/S/CM^2

EXIT  GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2      = 2.9194E-004      H      = 1.1081E-004      O      = 6.0256E-004
O2      = 1.3040E-001      OH     = 1.1556E-003      H2O    = 7.1571E-002
H2O     = 2.0144E-005      H2O2   = 4.3679E-007      C      = 2.3146E-012
CH      = 7.9775E-010      CH2    = 2.4013E-007      CH2(S) = 2.7155E-008
CH3     = 1.8624E-005      CH4    = 2.0408E-004      CO     = 2.9657E-003
CO2     = 3.3272E-002      HCO    = 3.2215E-007      CH2O   = 2.0017E-005
CH2OH   = 1.9729E-008      CH3O   = 2.3999E-008      CH3OH  = 1.1558E-006
C2H     = 1.4741E-012      C2H2   = 4.1723E-009      C2H3   = 5.0150E-010
C2H4    = 7.2527E-008      C2H5   = 5.1291E-009      C2H6   = 3.6296E-008
HCCO    = 9.5075E-010      CH2CO  = 6.1557E-008      HCCOH  = 1.1557E-010
N        = 1.5625E-011      NH     = 9.2935E-011      NH2    = 1.3211E-011
NH3     = 1.0932E-011      NNH    = 1.2934E-010      NO     = 4.9986E-007
NO2     = 2.1210E-009      N2O    = 6.1946E-007      HNO    = 9.5968E-011
CN       = 2.6348E-013      HCN    = 1.8713E-009      H2CN   = 2.6648E-014
HCNN    = 2.2937E-012      HCN0   = 4.0881E-010      HOCN   = 1.2663E-011
HNCO    = 1.6027E-009      NCO    = 8.6435E-011      N2     = 7.5936E-001
AR       = 0.0000E+000      C3H7   = 2.0421E-013      C3H8   = 7.2890E-012
CH2CHO  = 3.8462E-010      CH3CHO = 3.0233E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 244.9
Unburned Hydrocarbons (ppm): 223.2

CO      (ppmvd): 3194.
NO      (ppmvd): 0.5384
NOx     (ppmvd): 1.208
CO      (ppmvd 15% O2): 2756.
NO      (ppmvd 15% O2): 0.4645
NOx     (ppmvd 15% O2): 1.042

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(S)   = 9.0909E-002      H(S)   = 9.0909E-002      H2O(S) = 9.0909E-002
OH(S)   = 9.0909E-002      CO(S)  = 9.0909E-002      CO2(S) = 9.0909E-002
CH3(S)  = 9.0909E-002      CH2(S)s = 9.0909E-002      CH(S)  = 9.0909E-002
C(S)    = 9.0909E-002      O(S)   = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec  (microns/hr)

PT(B)  =  1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
=====

TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

```

Εικόνα 87: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 200CSI, 0.06mm

Για τον καταλύτη 200 κυφελών με πάχος τοιχωμάτων 0.08mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=296.0$ Pa, δηλαδή 0.04294 PSI / 11.43 cm = 0.003757 PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 1850805.44mm^2 αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 4.0002g .

```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME                2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE                1.1503E+02 GM/SEC
PRESSURE                      0.9971 ATM
MASS DENSITY                  2.2696E-04 GM/CM^3
VOLUME                        1014. CM^3
TOTAL MASS                    0.2301 G
TOTAL SURFACE AREA            0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO 0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION     1.7256E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1139.4211 K
TEMPERATURE                   1515.8518 K
SURF TEMP, CATALYST           1515.8518 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST           0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION,   0.0000E+00 CAL/S/CM^2
CATALYST

EXIT  GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2          = 2.9644E-004      H          = 1.1446E-004      O          = 6.1841E-004
O2          = 1.2977E-001      OH         = 1.1892E-003      H2O        = 7.2096E-002
HO2         = 1.9849E-005      H2O2       = 4.3095E-007      C          = 2.5468E-012
CH          = 8.4654E-010      CH2        = 2.4524E-007      CH2(S)     = 2.7724E-008
CH3         = 1.8514E-005      CH4        = 1.9994E-004      CO         = 2.9478E-003
CO2         = 3.3564E-002      HCO        = 3.2741E-007      CH2O       = 1.9752E-005
CH2OH      = 2.0165E-008      CH3O       = 2.3492E-008      CH3OH      = 1.1194E-006
C2H        = 1.5268E-012      C2H2       = 4.1057E-009      C2H3       = 4.9767E-010
C2H4       = 6.9265E-008      C2H5       = 4.9200E-009      C2H6       = 3.4233E-008
HCCO       = 9.4400E-010      CH2CO      = 5.9084E-008      HCCOH      = 1.1524E-010
N           = 1.6937E-011      NH         = 9.7766E-011      NH2        = 1.4135E-011
NH3        = 1.1675E-011      MNH        = 1.3444E-010      NO         = 5.3552E-007
NO2        = 2.2200E-009      N2O       = 6.2600E-007      HNO        = 1.0091E-010
CN         = 2.9127E-013      HCN       = 1.9665E-009      H2CN       = 2.8199E-014
HCNN       = 2.3949E-012      HCNO      = 4.3592E-010      HOCN       = 2.0117E-011
HNCO      = 1.7871E-009      NCO       = 9.2158E-011      N2         = 7.5914E-001
AR         = 1.2199E-018      C3H7      = 1.8876E-013      C3H8       = 6.5433E-012
CH2CHO     = 3.6963E-010      CH3CHO     = 2.8872E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 240.4
Unburned Hydrocarbons (ppm): 219.0

CO          (ppmvd): 3177.
NO          (ppmvd): 0.5771
NOx         (ppmvd): 1.254
CO          (ppmvd 15% O2): 2717.
NO          (ppmvd 15% O2): 0.4937
NOx         (ppmvd 15% O2): 1.073

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(S)      = 9.0909E-002      H(S)       = 9.0909E-002      H2O(S)     = 9.0909E-002
OH(S)      = 9.0909E-002      CO(S)      = 9.0909E-002      CO2(S)     = 9.0909E-002
CH3(S)     = 9.0909E-002      CH2(S)s    = 9.0909E-002      CH(S)      = 9.0909E-002
C(S)       = 9.0909E-002      O(S)       = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec (microns/hr)

PT(B) = 1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
=====

TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

```

Εικόνα 88: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 200CSI, 0.08mm

Για τον καταλύτη 200 κυφελών με πάχος τοιχωμάτων 0.12mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=355.0$ Pa, δηλαδή 0.05149 PSI / 11.43 cm = 0.004505 PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 1809894.41mm² αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 3.9117g.

```

=====
PSPRNT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME          2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE          1.1150E+02 GM/SEC
PRESSURE                0.9964 ATM
MASS DENSITY            2.2505E-04 GM/CM^3
VOLUME                  990.9 CM^3
TOTAL MASS              0.2230 G
TOTAL SURFACE AREA      0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO 0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION 1.7691E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1137.9098 K
TEMPERATURE             1527.1834 K
SURF TEMP, CATALYST     1527.1834 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST     0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION, CATALYST 0.0000E+00 CAL/S/CM^2

EXIT  GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2      = 3.0641E-004      H      = 1.2227E-004      O      = 6.5160E-004
O2      = 1.2848E-001      OH     = 1.2598E-003      H2O    = 7.3174E-002
HO2     = 1.9263E-005      H2O2  = 4.1945E-007      C      = 3.0937E-012
CH      = 9.5504E-010      CH2   = 2.5594E-007      CH2(S) = 2.8917E-008
CH3     = 1.8302E-005      CH4   = 1.9195E-004      CO     = 2.9146E-003
CO2     = 3.4162E-002      HCO   = 3.3839E-007      CH2O   = 1.9237E-005
CH2OH   = 2.1885E-008      CH3O  = 2.2525E-008      CH3OH  = 1.0493E-006
C2H     = 1.6405E-012      C2H2  = 3.9802E-009      C2H3  = 4.9054E-010
C2H4    = 6.3219E-008      C2H5  = 4.5261E-009      C2H6  = 3.0437E-008
HCCO    = 9.3162E-010      CH2CO = 5.4458E-008      HCCOH  = 1.1429E-010
N        = 1.9939E-011      NH    = 1.0818E-010      NH2    = 1.6111E-011
NH3     = 1.3217E-011      MNH   = 1.4538E-010      NO     = 6.1460E-007
NO2     = 2.4272E-009      N2O   = 6.3761E-007      HNO    = 1.1148E-010
CN       = 3.5340E-013      HCN   = 2.1433E-009      H2CN   = 3.1578E-014
HCNN    = 2.6128E-012      HCNO  = 4.8881E-010      HOCN   = 2.4431E-011
HMCO    = 1.9704E-009      MCO   = 1.0423E-010      N2     = 7.5868E-001
AR       = 0.0000E+000      C3H7  = 1.6116E-013      C3HB   = 5.2626E-012
CH2CHO  = 3.4155E-010      CH3CHO = 2.6321E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 231.6
Unburned Hydrocarbons (ppm): 210.7

CO      (ppmvd): 3145.
NO      (ppmvd): 0.6631
NOx     (ppmvd): 1.354
CO      (ppmvd 15% O2): 2644.
NO      (ppmvd 15% O2): 0.5574
NOx     (ppmvd 15% O2): 1.138

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(S)   = 9.0909E-002      H(S)    = 9.0909E-002      H2O(S)  = 9.0909E-002
OH(S)   = 9.0909E-002      CO(S)   = 9.0909E-002      CO2(S)  = 9.0909E-002
CH3(S)  = 9.0909E-002      CH2(S)s = 9.0909E-002      CH(S)   = 9.0909E-002
C(S)    = 9.0909E-002      O(S)    = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec  (microns/hr)

PT(B)  =  1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000

=====
TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

```

Εικόνα 89: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 200CSI, 0.12mm

Για τον καταλύτη 200 κυφελών με πάχος τοιχωμάτων 0.16mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=414.6$ Pa, δηλαδή 0.06013 PSI / 11.43 cm = 0.005261 PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 1768953.48mm² αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 3.8232g.

```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME          2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE          1.0000E+02 GM/SEC
PRESSURE                0.9959 ATM
MASS DENSITY            2.2317E-04 GM/CM^3
VOLUME                  968.4 CM^3
TOTAL MASS              0.2161 G
TOTAL SURFACE AREA      0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO 0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION 1.8138E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1136.2929 K
TEMPERATURE             1538.8663 K
SURF TEMP, CATALYST     1538.8663 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST     0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION, CATALYST 0.0000E+00 CAL/S/CM^2

EXIT  GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2      = 3.1752E-004   H      = 1.3064E-004   O      = 6.8624E-004
O2      = 1.2714E-001   OH     = 1.3347E-003   H2O    = 7.4292E-002
H2O     = 1.8682E-005   H2O2   = 4.0810E-007   C      = 3.7646E-012
CH      = 1.0786E-009   CH2    = 2.6722E-007   CH2(S) = 3.0173E-008
CH3     = 1.8101E-005   CH4    = 1.8423E-004   CO     = 2.8836E-003
CO2     = 3.4778E-002   HCO    = 3.4967E-007   CH2O   = 1.8736E-005
CH2OH   = 2.2069E-008   CH3O   = 2.1614E-008   CH3OH  = 9.8301E-007
C2H     = 1.7692E-012   C2H2   = 3.8711E-009   C2H3   = 4.8452E-010
C2H4    = 5.7823E-008   C2H5   = 4.1663E-009   C2H6   = 2.7073E-008
HCCO    = 9.2143E-010   CH2CO  = 5.0277E-008   HCCOH  = 1.1381E-010
N       = 2.3511E-011   NH     = 1.1967E-010   NH2    = 1.8330E-011
NH3     = 1.4782E-011   NNH    = 1.5730E-010   NO     = 7.0547E-007
NO2     = 2.6467E-009   N2O    = 6.4783E-007   HNO    = 1.2314E-010
CN      = 4.3132E-013   HCN    = 2.3632E-009   H2CN   = 3.5455E-014
HCNN    = 2.8506E-012   HCNO   = 5.4950E-010   HOCN   = 3.1489E-011
HNCO   = 2.1757E-009   NCO    = 1.1807E-010   N2     = 7.5819E-001
AR      = 0.0000E+000   C3H7   = 1.3761E-013   C3HB   = 4.2279E-012
CH2CHO  = 3.1604E-010   CH3CHO = 2.3996E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 223.1
Unburned Hydrocarbons (ppm): 202.8

CO      (ppmvd): 3115.
NO      (ppmvd): 0.7621
NOx     (ppmvd): 1.465
CO      (ppmvd 15% O2): 2572.
NO      (ppmvd 15% O2): 0.6293
NOx     (ppmvd 15% O2): 1.210

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(S)   = 9.0909E-002   H(S)     = 9.0909E-002   H2O(S)  = 9.0909E-002
OH(S)   = 9.0909E-002   CO(S)    = 9.0909E-002   CO2(S)  = 9.0909E-002
CH3(S)  = 9.0909E-002   CH2(S)s  = 9.0909E-002   CH(S)   = 9.0909E-002
C(S)    = 9.0909E-002   O(S)     = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec  (microns/hr)

PT(B)  =  1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
=====

TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

```

Εικόνα 90: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 200CSI, 0.16mm

Για τον καταλύτη 400 κυφελών με πάχος τοιχωμάτων 0.05mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=532.4$ Pa, δηλαδή 0.07722 PSI / 11.43 cm = 0.006756 PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 2635516.44mm² αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 5.6961g.

```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME          2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE          1.1586E+02 GM/SEC
PRESSURE                0.9947 ATM
MASS DENSITY            2.2688E-04 GM/CM^3
VOLUME                  1021. CM^3
TOTAL MASS              0.2317 G
TOTAL SURFACE AREA      0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO 0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION 1.7115E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1139.1704 K
TEMPERATURE             1512.7974 K
SURF TEMP, CATALYST     1512.7974 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST     0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION, CATALYST 0.0000E+00 CAL/S/CM^2

EXIT  GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2      = 2.9502E-004    H      = 1.1312E-004    O      = 6.1199E-004
O2      = 1.3007E-001    OH     = 1.1734E-003    H2O    = 7.1849E-002
H2O     = 2.0014E-005    H2O2   = 4.3430E-007    C      = 2.4516E-012
CH      = 8.2603E-010    CH2    = 2.4316E-007    CH2(S) = 2.7492E-008
CH3     = 1.8585E-005    CH4    = 2.0238E-004    CO     = 2.9623E-003
CO2     = 3.3421E-002    HCO    = 3.2582E-007    CH2O   = 1.9915E-005
CH2OH   = 1.9977E-008    CH3O   = 2.3777E-008    CH3OH  = 1.1369E-006
C2H     = 1.4826E-012    C2H2   = 4.0903E-009    C2H3   = 4.9472E-010
C2H4    = 7.0129E-008    C2H5   = 4.9657E-009    C2H6   = 3.4781E-008
HCCO    = 9.3927E-010    CH2CO  = 5.9748E-008    HCCOH  = 1.1369E-010
N       = 1.6316E-011    NH     = 9.5475E-011    NH2    = 1.3640E-011
NH3     = 1.1294E-011    NNH    = 1.3208E-010    NO     = 5.1672E-007
NO2     = 2.1788E-009    N2O    = 6.2081E-007    HNO    = 9.8418E-011
CN      = 2.7695E-013    HCN    = 1.9092E-009    H2CN   = 2.7487E-014
HCNN    = 2.3528E-012    HCNO   = 4.2079E-010    HOCN   = 1.9242E-011
HNCO   = 1.7340E-009    NCO    = 8.9095E-011    N2     = 7.5924E-001
AR      = 0.0000E+000    C3H7   = 1.9392E-013    C3H8   = 6.8164E-012
CH2CHO  = 3.7373E-010    CH3CHO = 2.9236E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 243.1
Unburned Hydrocarbons (ppm): 221.5

CO      (ppmvd): 3192.
NO      (ppmvd): 0.5567
NOx     (ppmvd): 1.228
CO      (ppmvd 15% O2): 2741.
NO      (ppmvd 15% O2): 0.4782
NOx     (ppmvd 15% O2): 1.055

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(S)   = 9.0909E-002    H(S)    = 9.0909E-002    H2O(S) = 9.0909E-002
OH(S)   = 9.0909E-002    CO(S)   = 9.0909E-002    CO2(S) = 9.0909E-002
CH3(S)  = 9.0909E-002    CH2(S)  = 9.0909E-002    CH(S)  = 9.0909E-002
C(S)    = 9.0909E-002    O(S)    = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec (microns/hr)

PT(B)  =  1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
=====

TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

```

Εικόνα 91: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 400CSI, 0.05mm

Για τον καταλύτη 400 κυφελών με πάχος τοιχωμάτων 0.06mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=565.1$ Pa, δηλαδή 0.08197 PSI / 11.43 cm = 0.007171 PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 2614598.22mm² αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 5.6509g.

```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME          2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE          1.1460E+02 GM/SEC
PRESSURE                 0.9944 ATM
MASS DENSITY            2.2621E-04 GM/CM^3
VOLUME                  1013. CM^3
TOTAL MASS              0.2292 G
TOTAL SURFACE AREA      0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO 0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION 1.7266E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1138.6209 K
TEMPERATURE             1516.7136 K
SURF TEMP, CATALYST     1516.7136 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST    0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION,
CATALYST                0.0000E+00 CAL/S/CM^2

EXIT  GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2      = 2.9834E-004   H      = 1.1578E-004   O      = 6.2343E-004
O2      = 1.2962E-001   OH     = 1.1975E-003   H2O    = 7.2222E-002
H2O     = 1.9808E-005   H2O2   = 4.3022E-007   C      = 2.6251E-012
CH      = 8.6178E-010   CH2    = 2.4684E-007   CH2(S) = 2.7902E-008
CH3     = 1.8509E-005   CH4    = 1.9950E-004   CO     = 2.9503E-003
CO2     = 3.3628E-002   HCO    = 3.2966E-007   CH2O   = 1.9731E-005
CH2OH   = 2.0291E-008   CH3O   = 2.3425E-008   CH3OH  = 1.1115E-006
C2H     = 1.5194E-012   C2H2   = 4.0432E-009   C2H3   = 4.9200E-010
C2H4    = 6.7879E-008   C2H5   = 4.8207E-009   C2H6   = 3.3363E-008
HCCO    = 9.3451E-010   CH2CO  = 5.8037E-008   HCCOH  = 1.1325E-010
N        = 1.7277E-011   NH     = 9.8964E-011   NH2    = 1.4351E-011
NH3     = 1.1913E-011   NNH    = 1.3576E-010   NO     = 5.4239E-007
NO2     = 2.2400E-009   N2O    = 6.2514E-007   HNO    = 1.0197E-010
CN      = 2.9700E-013   HCN    = 1.9745E-009   H2CN   = 2.8609E-014
HCNN    = 2.4263E-012   HCNO   = 4.3901E-010   HOCN   = 2.0174E-011
HMCO    = 1.8017E-009   NCO    = 9.3231E-011   N2     = 7.5908E-001
AR      = 0.0000E+000   C3H7   = 1.8339E-013   C3H8   = 6.3138E-012
CH2CHO  = 3.6337E-010   CH3CHO = 2.8295E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 239.9
Unburned Hydrocarbons (ppm): 218.5

CO      (ppmvd): 3180.
NO      (ppmvd): 0.5846
NOx     (ppmvd): 1.261
CO      (ppmvd 15% O2): 2715.
NO      (ppmvd 15% O2): 0.4991
NOx     (ppmvd 15% O2): 1.076

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(S)   = 9.0909E-002   H(S)   = 9.0909E-002   H2O(S) = 9.0909E-002
OH(S)   = 9.0909E-002   CO(S)  = 9.0909E-002   CO2(S) = 9.0909E-002
CH3(S)  = 9.0909E-002   CH2(S)s = 9.0909E-002   CH(S)  = 9.0909E-002
C(S)    = 9.0909E-002   O(S)   = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec (microns/hr)

PT(B)  =  1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
=====

TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

```

Εικόνα 92: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 400CSI, 0.06mm

Για τον καταλύτη 400 κυφελών με πάχος τοιχωμάτων 0.08mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=579.3$ Pa, δηλαδή 0.08402 PSI / 11.43 cm = $0.007350=1$ PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 2572861.32mm^2 αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 5.5607g .

```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME                2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE                 1.1210E+02 GM/SEC
PRESSURE                       0.9943 ATM
MASS DENSITY                   2.2495E-04 GM/CM^3
VOLUME                         996.7 CM^3
TOTAL MASS                     0.2242 G
TOTAL SURFACE AREA             0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO  0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION      1.7579E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1137.6064 K
TEMPERATURE                    1524.7702 K
SURF TEMP, CATALYST            1524.7702 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST           0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION,
CATALYST                       0.0000E+00 CAL/S/CM^2

EXIT  GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2      = 3.0527E-004      H      = 1.2124E-004      O      = 6.4670E-004
O2      = 1.2871E-001      OH     = 1.2473E-003      H2O    = 7.2985E-002
HO2     = 1.9390E-005      H2O2  = 4.2200E-007      C      = 3.0086E-012
CH      = 9.3792E-010      CH2   = 2.5436E-007      CH2(5) = 2.8739E-008
CH3     = 1.8357E-005      CH4   = 1.9377E-004      CO     = 2.9259E-003
CO2     = 3.4051E-002      HCO   = 3.3729E-007      CH2O  = 1.9361E-005
CH2OH  = 2.0938E-008      CH3O  = 2.2733E-008      CH3OH = 1.0619E-006
C2H    = 1.6001E-012      C2H2  = 3.9586E-009      C2H3  = 4.8727E-010
C2H4   = 6.3667E-008      C2H5  = 4.5460E-009      C2H6  = 3.0712E-008
HCCO   = 9.2624E-010      CH2CO = 5.4811E-008      HCCOH = 1.1263E-010
N       = 1.9384E-011      NH    = 1.0630E-010      NH2   = 1.5764E-011
NH3    = 1.3038E-011      NNH   = 1.4346E-010      NO    = 5.9819E-007
NO2    = 2.3154E-009      N2O   = 6.3369E-007      HNO   = 1.0945E-010
CN     = 3.4099E-013      HCN   = 2.1044E-009      H2CN  = 3.0991E-014
HCNN   = 2.5794E-012      HCNO  = 4.7508E-010      HOCN  = 1.9626E-011
HNCO   = 1.9346E-009      NCO   = 1.0188E-010      N2    = 7.5875E-001
AR     = 0.0000E+000      C3H7  = 1.6403E-013      C3H8  = 5.4139E-012
CH2CHO = 3.4372E-010      CH3CHO = 2.6508E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 233.6
Unburned Hydrocarbons (ppm): 212.6

CO      (ppmvd): 3156.
NO      (ppmvd): 0.6453
NOx     (ppmvd): 1.331
CO      (ppmvd 15% O2): 2661.
NO      (ppmvd 15% O2): 0.5441
NOx     (ppmvd 15% O2): 1.123

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(5)   = 9.0909E-002      H(5)   = 9.0909E-002      H2O(5) = 9.0909E-002
OH(5)   = 9.0909E-002      CO(5)  = 9.0909E-002      CO2(5) = 9.0909E-002
CH3(5)  = 9.0909E-002      CH2(5)s = 9.0909E-002      CH(5)  = 9.0909E-002
C(5)    = 9.0909E-002      O(5)   = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec (microns/hr)

PT(B)   = 1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
=====

TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

```

Εικόνα 93: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 400CSI, 0.08mm

Για τον καταλύτη 400 κυφελών με πάχος τοιχωμάτων 0.12mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=689.2$ Pa, δηλαδή 0.09996 PSI / 11.43 cm = $0.008746=1$ PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 2489412.28mm^2 αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 5.3804g .

```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME          2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE          1.0724E+02 GM/SEC
PRESSURE                 0.9932 ATM
MASS DENSITY            2.2220E-04 GM/CM^3
VOLUME                  965.3 CM^3
TOTAL MASS              0.2145 G
TOTAL SURFACE AREA      0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO 0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION 1.8204E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1135.2490 K
TEMPERATURE             1541.2669 K
SURF TEMP, CATALYST     1541.2669 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST     0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION, CATALYST 0.0000E+00 CAL/S/CM^2

EXIT  GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2      = 3.2119E-004      H      = 1.3324E-004      O      = 6.9614E-004
O2      = 1.2681E-001      OH     = 1.3537E-003      H2O    = 7.4566E-002
HO2     = 1.8569E-005      H2O2   = 4.0595E-007      C      = 3.9767E-012
CH      = 1.1148E-009      CH2    = 2.7040E-007      CH2(5) = 3.0528E-008
CH3     = 1.8073E-005      CH4    = 1.8287E-004      CO     = 2.8828E-003
CO2     = 3.4923E-002      HCO    = 3.5346E-007      CH2O   = 1.8656E-005
CH2OH   = 2.2337E-008      CH3O   = 2.1445E-008      CH3OH  = 9.6796E-007
C2H     = 1.7799E-012      C2H2   = 3.8045E-009      C2H3   = 4.7875E-010
C2H4    = 5.6102E-008      C2H5   = 4.0411E-009      C2H6   = 2.6003E-008
HCCO    = 9.1182E-010      CH2CO  = 4.8945E-008      HCCOH  = 1.1201E-010
N        = 2.4481E-011      NH     = 1.2262E-010      NH2    = 1.8863E-011
NH3     = 1.5126E-011      NNH    = 1.6042E-010      NO     = 7.2678E-007
NO2     = 2.6984E-009      N2O    = 6.4775E-007      HNO    = 1.2593E-010
CN       = 4.5224E-013      HCN    = 2.4207E-009      H2CN   = 3.6521E-014
HCNN    = 2.9187E-012      HCNO   = 5.6244E-010      HOCN   = 3.4068E-011
HNCO    = 2.2221E-009      NCO    = 1.2136E-010      N2     = 7.5807E-001
AR       = 0.0000E+000      C3H7   = 1.3106E-013      C3H8   = 3.9681E-012
CH2CHO  = 3.0795E-010      CH3CHO = 2.3248E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 221.6
Unburned Hydrocarbons (ppm): 201.4

CO      (ppmvd): 3115.
NO      (ppmvd): 0.7853
NOx     (ppmvd): 1.488
CO      (ppmvd 15% O2): 2561.
NO      (ppmvd 15% O2): 0.6457
NOx     (ppmvd 15% O2): 1.224

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(5)   = 9.0909E-002      H(5)   = 9.0909E-002      H2O(5) = 9.0909E-002
OH(5)   = 9.0909E-002      CO(5)  = 9.0909E-002      CO2(5) = 9.0909E-002
CH3(5)  = 9.0909E-002      CH2(5)s = 9.0909E-002      CH(5)  = 9.0909E-002
C(5)    = 9.0909E-002      O(5)   = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec (microns/hr)

PT(B)  =  1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
=====

TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

```

Εικόνα 94: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 400CSI, 0.12mm

Για τον καταλύτη 400 κυφελών με πάχος τοιχωμάτων 0.16mm χρησιμοποιήθηκε η $\Delta P=752.2$ Pa, δηλαδή 0.10909 PSI / 11.43 cm = $0.008746=1$ PSI/cm πτώση πίεσης, για τη ποσότητα ευγενών μετάλλων, με δεδομένη επιφάνεια καταλύτη 2405956.00mm^2 αντιστοιχεί στον καταλύτη ποσότητα 5.200g .

```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from TWOPNT:
=====

RESIDENCE TIME          2.0000E-03 SEC
MASS FLOW RATE          1.0254E+02 GM/SEC
PRESSURE                 0.9926 ATM
MASS DENSITY            2.1950E-04 GM/CM^3
VOLUME                  934.3 CM^3
TOTAL MASS              0.2051 G
TOTAL SURFACE AREA      0.000 CM^2
TOTAL SURFACE TO VOLUME RATIO 0.000 CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION 1.8855E+01 CAL/S/CM^3
TEMPERATURE (INLET: C4_Inlet1) 715.0000 K
TEMPERATURE (INLET: homogeneous_stage_combustor_(C3)_to_excess_air_dilution_(C4_R1)) 1132.7969 K
TEMPERATURE             1558.5808 K
SURF TEMP, CATALYST     1558.5808 K (same as gas temp)
HEAT LOSS, CATALYST     0.000 CAL/SEC
SURF CHEM HEAT PRODUCTION, CATALYST 0.0000E+00 CAL/S/CM^2

EXIT  GAS PHASE MOLE FRACTIONS

H2      = 3.3962E-004      H      = 1.4652E-004      O      = 7.4877E-004
O2      = 1.2481E-001      OH     = 1.4695E-003      H2O    = 7.6228E-002
HO2     = 1.7750E-005      H2O2   = 3.9007E-007      C      = 5.2762E-012
CH      = 1.3281E-009      CH2    = 2.8766E-007      CH2(5) = 3.2456E-008
CH3     = 1.7804E-005      CH4    = 1.7243E-004      CO     = 2.8439E-003
CO2     = 3.5835E-002      HCO    = 3.7019E-007      CH2O   = 1.7970E-005
CH2OH   = 2.3878E-008      CH3O   = 2.0254E-008      CH3OH  = 8.8075E-007
C2H     = 1.9955E-012      C2H2   = 3.6798E-009      C2H3   = 4.7238E-010
C2H4    = 4.9631E-008      C2H5   = 3.5965E-009      C2H6   = 2.2025E-008
HCCO    = 9.0173E-010      CH2CO  = 4.3840E-008      HCCOH  = 1.1150E-010
N       = 3.1049E-011      NH     = 1.4150E-010      NH2    = 2.2787E-011
NH3     = 1.8032E-011      NNH    = 1.7965E-010      NO     = 8.8467E-007
NO2     = 2.8373E-009      N2O    = 6.5903E-007      HNO    = 1.4510E-010
CN      = 6.0243E-013      HCN    = 2.7809E-009      H2CN   = 4.3171E-014
HCNN    = 3.3025E-012      HCNO   = 6.5695E-010      HOCN   = 3.0301E-011
HNCO    = 2.5649E-009      NCO    = 1.4547E-010      N2     = 7.5735E-001
AR      = 0.0000E+000      C3H7   = 1.0470E-013      C3H8   = 2.8986E-012
CH2CHO  = 2.7658E-010      CH3CHO = 2.0387E-008

Volatile Organic Compounds (ppm): 210.1
Unburned Hydrocarbons (ppm): 190.7

CO      (ppmvd): 3079.
NO      (ppmvd): 0.9577
NOx     (ppmvd): 1.674
CO      (ppmvd 15% O2): 2466.
NO      (ppmvd 15% O2): 0.7673
NOx     (ppmvd 15% O2): 1.341

SURFACE SITE FRACTIONS IN SURFACE PHASE, PT_SURFACE
Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Standard State Site density = 2.7063E-09 mole/cm^2
Rate of change of site density = 0.000 mole/(cm^2*sec)

PT(5)   = 9.0909E-002      H(5)   = 9.0909E-002      H2O(5) = 9.0909E-002
OH(5)   = 9.0909E-002      CO(5)  = 9.0909E-002      CO2(5) = 9.0909E-002
CH3(5)  = 9.0909E-002      CH2(5)s = 9.0909E-002      CH(5)  = 9.0909E-002
C(5)    = 9.0909E-002      O(5)   = 9.0909E-002

BULK PHASE MOLE FRACTIONS AND ACTIVITIES IN BULK PHASE, PT_BULK
Linear growth rate of this bulk phase = 0.000 cm/sec
Total growth rate of this bulk phase = 0.000 gm/sec
Density of the bulk phase = -1.000 gm/cm^3
Average molecular weight of bulk phase = 195.1 gm/mole

Species Name  Mole_frac  Activity  Density  -----Growth Rate-----
              (gm/cm^3)  mole/(cm^2*sec)  gm/(cm^2*sec)  cm/sec (microns/hr)

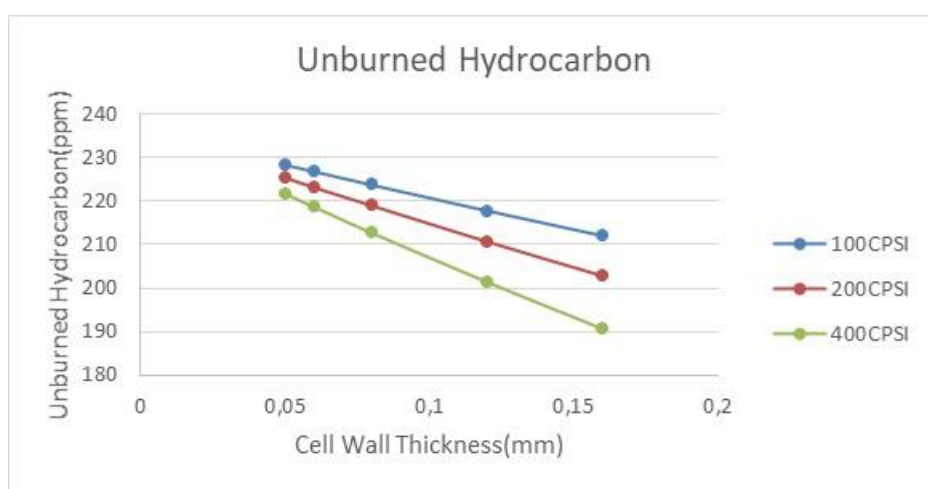
PT(B)  =  1.000  1.000  -1.000  0.000  0.000  0.000  0.000
=====

TWOPNT: SUCCESS. PROBLEM SOLVED.
=====

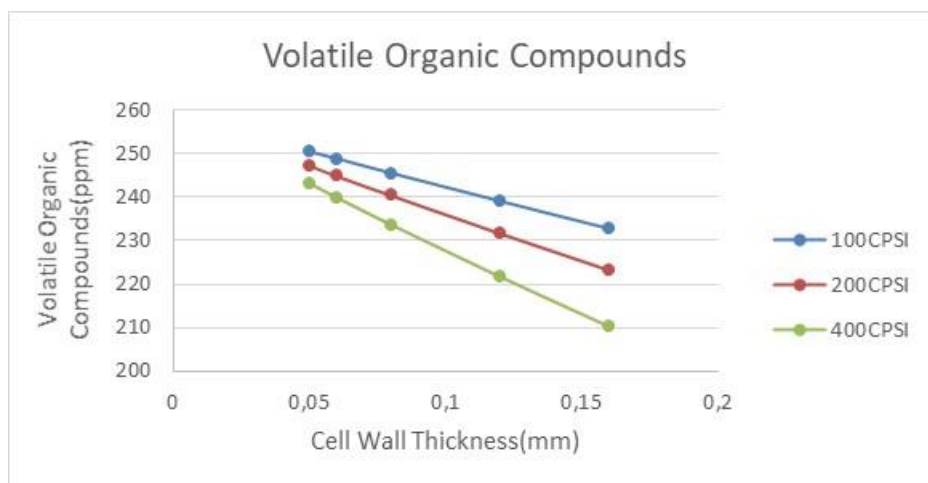
```

Εικόνα 95: Αποτελέσματα Chemkin για τον καταλύτη 400CSI, 0.16mm

Από τις αναλύσεις στο Chemkin προκύπτουν συμπεράσματα σχετικά με τις ποσότητες ακαύστων υδρογονανθράκων καθώς και των πτητικών οργανικών ενώσεων που εξέρχονται από το σύστημα εξαγωγής μιας MEK. Παρατηρείται πως στην πλειοψηφία των περιπτώσεων, μπορεί να αντικατασταθεί ένας πυκνός καταλυτικός μετατροπέας με έναν καταλυτικό μετατροπέα λιγότερο πυκνό με μεγαλύτερα πάχη τοιχωμάτων, δίνοντας έτσι ένα αποτέλεσμα με λιγότερο έντονο το φαινόμενο της αντίθλιψης, αλλά ταυτόχρονα λιγότερη ποσότητα ευγενών μετάλλων, έτσι, θα μπορεί η MEK να λειτουργήσει πιο αποδοτικά σε ίδιες συνθήκες, αλλά θα έχει γίνει ήδη και εξοικονόμηση στην παραγωγή του καταλύτη λόγω μικρότερης ποσότητας ευγενών μετάλλων.



Εικόνα 96: Συγκεντρωτικά αποτελέσματα για άκαυστους υδρογονάνθρακες



Εικόνα 97: Συγκεντρωτικά αποτελέσματα για πτητικές οργανικές ενώσεις

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

5. Συμπεράσματα και Εισηγήσεις

5.1 Συμπεράσματα Εργασίας

Ο καταλυτικός μετατροπέας χρησιμοποιείται για τον έλεγχο εκπομπών των ρύπων μετατρέποντας τα τοξικά αέρια σε λιγότερο τοξικά με τη κατάλυση μιας οξειδοαναγωγικής χημικής αντίδρασης. Επινοήθηκε από τον Γάλλο μηχανικό και ειδικό στην καταλυτική αναμόρφωση του πετρελαίου, Eugene Houdry. Υπάρχουν οι διοδικό μετατροπείς, οι οποίοι συνδυάζουν οξυγόνο με μονοξείδιο του άνθρακα (CO) και άκαυστους υδρογονάνθρακες (HC) για να παραγάγουν νερό (H₂O) και διοξείδιο του άνθρακα (CO₂) ενώ υπάρχουν και οι τριοδικοί μετατροπείς που μπορούν και μειώνουν επίσης και τα οξείδια του αζώτου (NO_x).

Η βιβλιογραφία προσφέρει αρκετές πληροφορίες για το συγκεκριμένο θέμα. Τα βασικά θέματα που καλύπτει η βιβλιογραφία αναφέρονται σε παρόμοιες εργασίες που μελετούν πώς η δομή του καταλύτη επηρεάζει τη ροή, την απόδοση και τις πιέσεις ενώ οι περισσότερες αναλύσεις έχουν γίνει με τη χρήση του Ansys και Chemkin. Κάποιοι προτείνουν και εναλλακτικές δομές στο εσωτερικό του καταλύτη ή και την προσθήκη κιβωτίου αέρα για την βελτίωση της απόδοσης του καταλύτη.

Για τη μελέτη της επίδρασης των γεωμετρικών χαρακτηριστικών του καταλύτη, σχεδιάστηκαν στα πλαίσια της εργασίας αυτής καταλύτες με τρεις διαφορετικές πυκνότητες κυψελών (100CPSI, 200CPSI, 400CPSI) και για κάθε μία από αυτές μεταβλήθηκε το πάχος των εσωτερικών τοιχωμάτων του υποστρώματος καταλύτη. Ο σχεδιασμός έγινε στο πρόγραμμα Solidworks.

Για την ανάλυση χρησιμοποιήθηκαν το ANSYS Fluent και το Chemkin. Από τα αποτελέσματα των αναλύσεων στο ANSYS προέκυψε ότι το φαινόμενο της αντίθλιψης είναι κλιμακωτά εντονότερο στους πυκνότερους καταλύτες. Συνεπώς, σε αραιότερους καταλύτες δεν προκαλείται σημαντική επίδραση με την αύξηση του πάχους των τοιχωμάτων των κυψελών. Από τις αναλύσεις στο Chemkin προκύπτουν συμπεράσματα σχετικά με τις ποσότητες ακαύστων υδρογονανθράκων καθώς και των πτητικών

οργανικών ενώσεων που εξέρχονται από το σύστημα εξαγωγής μιας ΜΕΚ. Όσο αυξάνεται η πυκνότητα των κυψελών και το πάχος των τοιχωμάτων μειώνονται οι άκαυστοι υδρογονάνθρακες και τα βλαβερά καυσαέρια. Παρατηρείται όμως ότι μπορεί να αντικατασταθεί ένας πυκνός καταλυτικός μετατροπέας με έναν καταλυτικό μετατροπέα λιγότερο πυκνό με μεγαλύτερα πάχη τοιχωμάτων, δίνοντας έτσι ένα αποτέλεσμα με λιγότερο έντονο το φαινόμενο της αντίθλιψης, αλλά ταυτόχρονα λιγότερη ποσότητα ευγενών μετάλλων. Με τον τρόπο αυτό είναι ταυτόχρονα δυνατή η εξοικονόμηση στην παραγωγή του καταλύτη λόγω μικρότερης ποσότητας ευγενών μετάλλων.

5.4 Εισηγήσεις για Περαιτέρω Έρευνα

Η εργασία αυτή μπορεί να αποτελέσει μία βάση για την έναρξη ερευνών στο συγκεκριμένο πεδίο.

Πρόσθετες έρευνες μπορούν να γίνουν, με μεγαλύτερη ποικιλία καταλυτικών μετατροπέων ως προς το πάχος των κυψελών και την πυκνότητά τους. Ακόμη, η ανάλυση Chemkin θα μπορούσε να συνδυαστεί με εκείνη του ANSYS, εισάγοντάς την και τρέχοντας τις αναλύσεις στον Ansys Fluent. Ως πρόταση για περαιτέρω έρευνα θα αποτελούσε και η μελέτη επιπρόσθετων καυσίμων πέραν του μεθανίου και για διοδικούς και για τριοδικούς καταλύτες.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Καταλυτικός μετατροπέας. (2021). Retrieved 4 February 2021, from https://el.wikipedia.org/wiki/%CE%9A%CE%B1%CF%84%CE%B1%CE%BB%CF%85%CF%84%CE%B9%CE%BA%CF%8C%CF%82_%CE%BC%CE%B5%CF%84%CE%B1%CF%84%CF%81%CE%BF%CF%80%CE%AD%CE%B1%CF%82
- [2] Εργαστήριο Φυσικοχημείας και Χημικών Διεργασιών: Προπτυχιακό επίπεδο. (2021). Retrieved 4 February 2021, from <https://www.pccplab.tuc.gr/el/ekpaideysi/proptychiako-epipedo>
- [3] Schweich, D., & Leclerc, J. (1991). Flow, Heat, and Mass Transfer in a Monolithic Catalytic Converter. *Studies In Surface Science And Catalysis*, 437-463. doi: 10.1016/s0167-2991(08)62995-x
- [4] Premkumar, A., Aravinthasamy, B., Balaji, M., Boopathiraja, S., & Dhinesh, S. (2019). CFD Modeling of the Automobile Catalytic Converter. *International Journal Of Engineering Science And Computing*, 9(3). Retrieved from [https://ijesc.org/upload/49587c02d1aa3e909889c584c705fa30.CFD%20Modeling%20of%20the%20Automobile%20Catalytic%20Converter%20\(2\).pdf](https://ijesc.org/upload/49587c02d1aa3e909889c584c705fa30.CFD%20Modeling%20of%20the%20Automobile%20Catalytic%20Converter%20(2).pdf)
- [5] Ramasubramanian, S., Ganesh, M., & Karikalan, L. (2019). Design And Analysis Of Catalytic Converter Model With Shape Change For Overall Improvement In Fluid Flow. *INTERNATIONAL JOURNAL OF SCIENTIFIC & TECHNOLOGY RESEARCH*, 8(11).
- [6] Vaghela, Jigar & Jejurkar, Avdhoot. (2018). CFD Analysis of Catalytic Converter for Mitigation of Emission. 10.13140/RG.2.2.23868.13447
- [7] Computer-aided design. (2021). Retrieved 5 January 2021, from https://en.wikipedia.org/wiki/Computer-aided_design
- [8] Μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων. (2021). Retrieved 30 November 2020, from https://el.wikipedia.org/wiki/%CE%9C%CE%AD%CE%B8%CE%BF%CE%B4%CE%BF%CF%82_%CF%80%CE%B5%CF%80%CE%B5%CF%81%CE%B1%CF%83%CE%BC%CE%AD%CE%BD%CF%89%CE%BD_%CF%83%CF%84%CE%BF%CE%B9%CF%87%CE%B5%CE%AF%CF%89%CE%BD

4

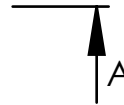
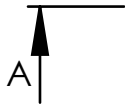
3

2

1

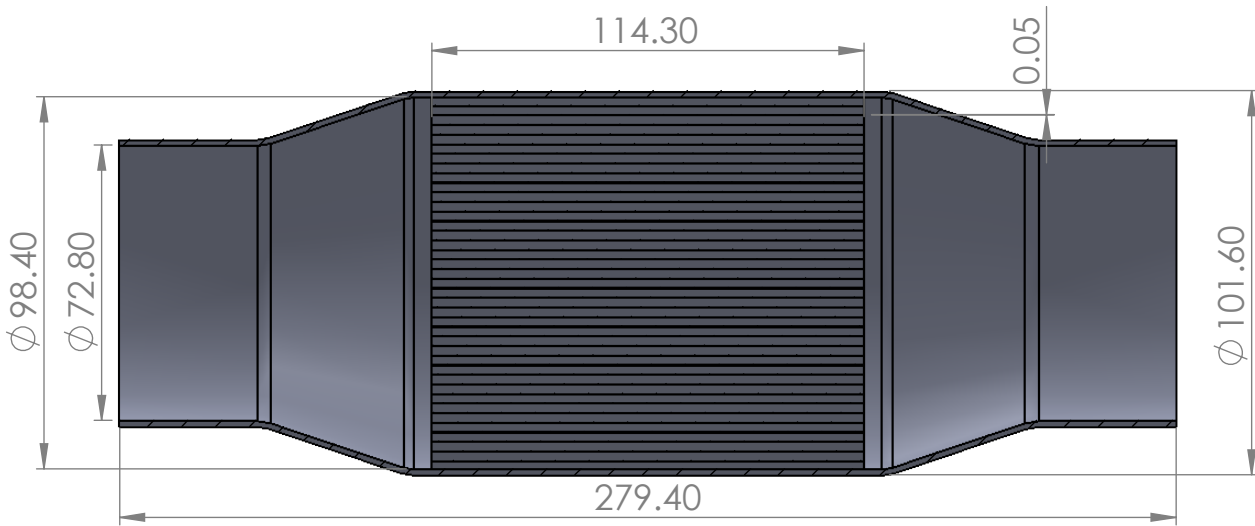
F

F



E

E



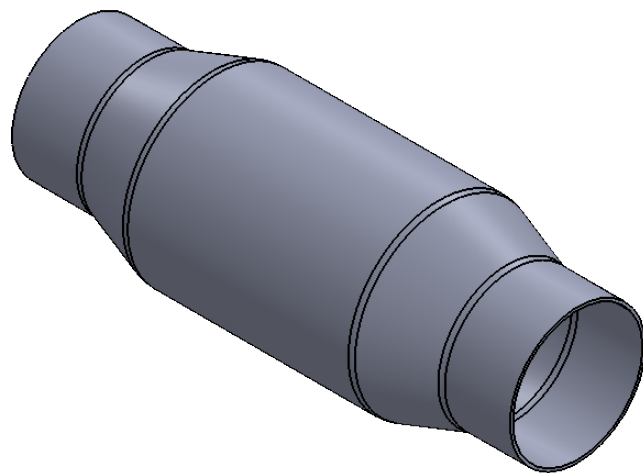
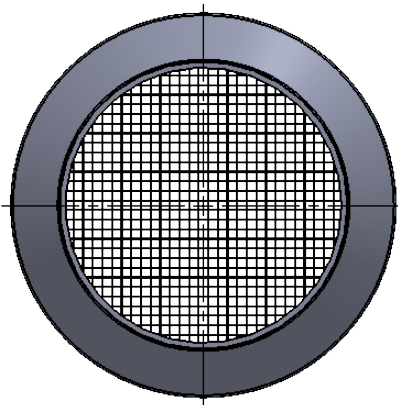
SECTION A-A
SCALE 1 : 2

D

D

C

C



B

B

UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
SURFACE FINISH:
TOLERANCES:
LINEAR:
ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
BREAK SHARP
EDGES

SCALE: 1/2

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Matthaios Alpas		
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:
100CPSI 0.05mm

DWG NO.
100t005

A4

WEIGHT:

SCALE:1:3

SHEET 1 OF 1

4

3

2

1

A

A

4

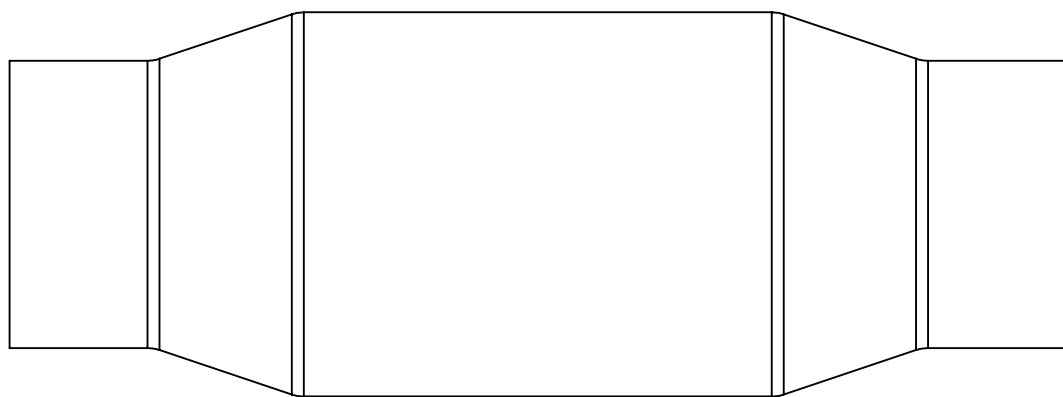
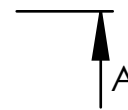
3

2

1

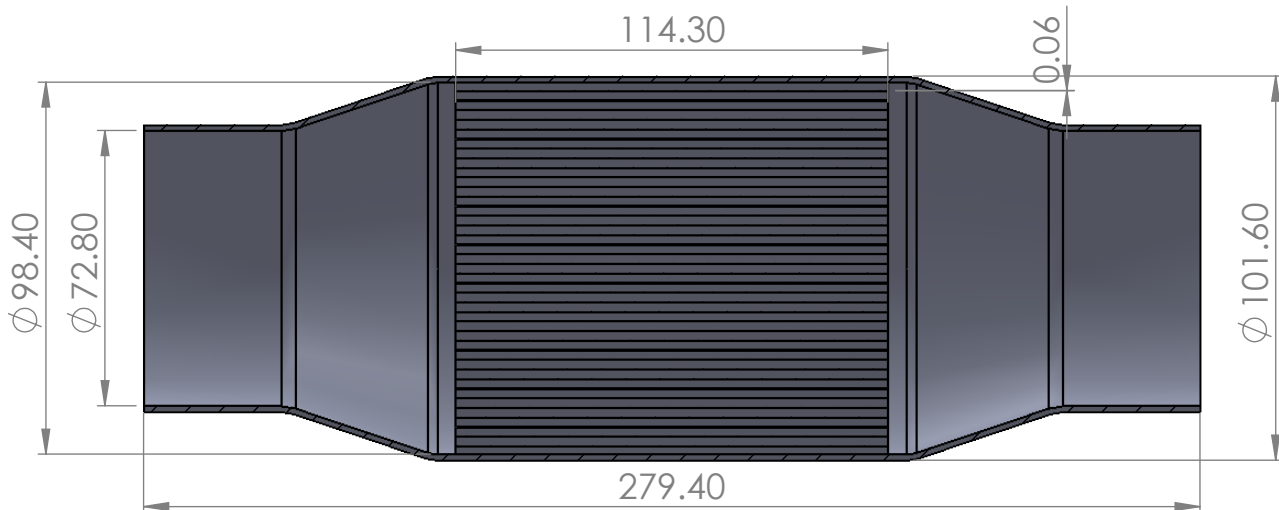
F

F



E

E



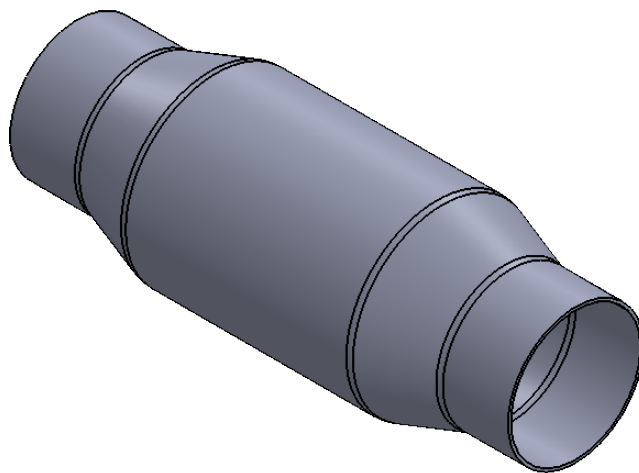
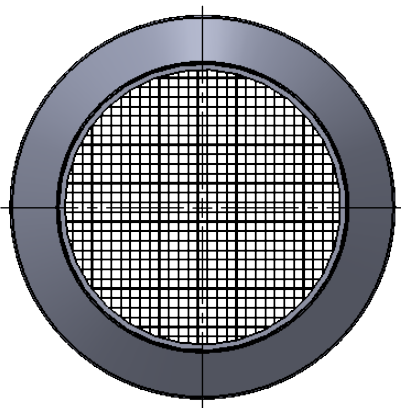
D

D

SECTION A-A
SCALE 1 : 2

C

C



B

B

UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
SURFACE FINISH:
TOLERANCES:
LINEAR:
ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
BREAK SHARP
EDGES

SCALE: 1/2

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Matthaios Alpas		
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:
100CPSI 0.06mm

DWG NO.
100t006

A4

WEIGHT:

SCALE:1:3

SHEET 1 OF 1

4

3

2

1

A

A

4

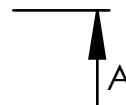
3

2

1

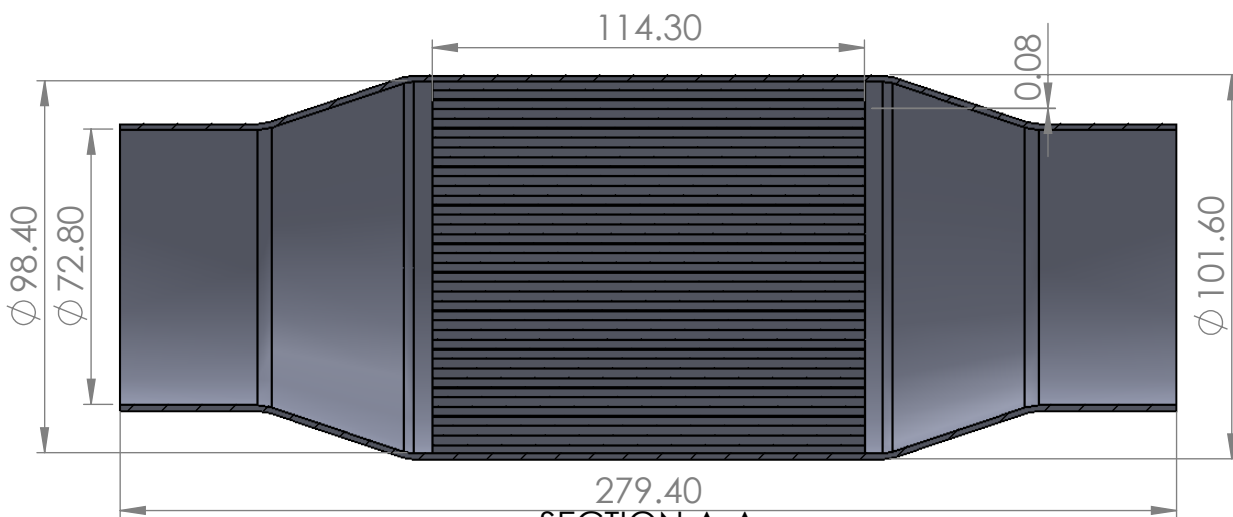
F

F



E

E



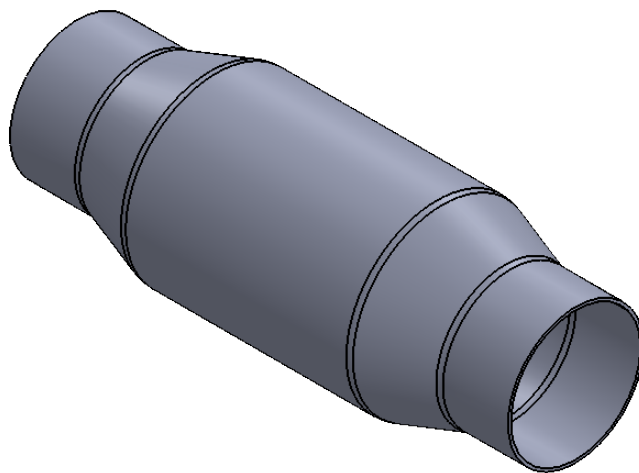
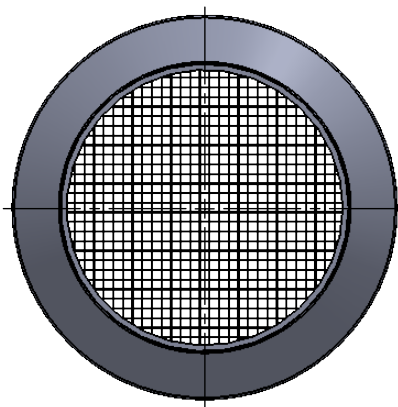
SECTION A-A
SCALE 1 : 2

D

D

C

C



B

B

UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
SURFACE FINISH:
TOLERANCES:
LINEAR:
ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
BREAK SHARP
EDGES

SCALE: 1/2

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE	
DRAWN	Matthaios Alpas			
CHK'D				
APPV'D				
MFG				
Q.A				
				MATERIAL:
				WEIGHT:

TITLE:
100CPSI 0.08mm

DWG NO.
100t008

A4

SCALE:1:3

SHEET 1 OF 1

A

A

4

3

2

1

4

3

2

1

F

F

E

E

D

D

C

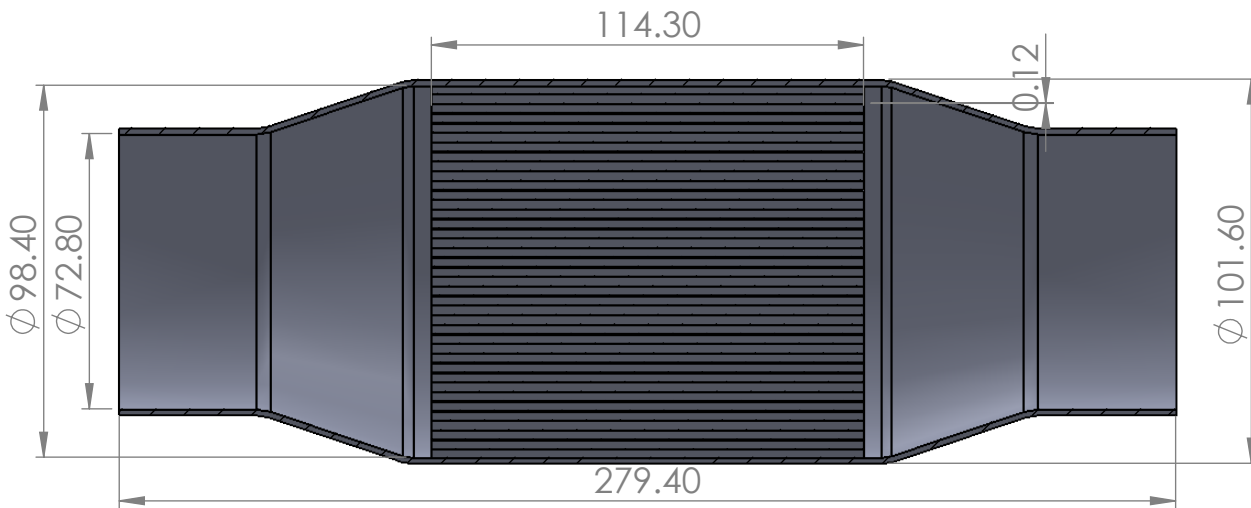
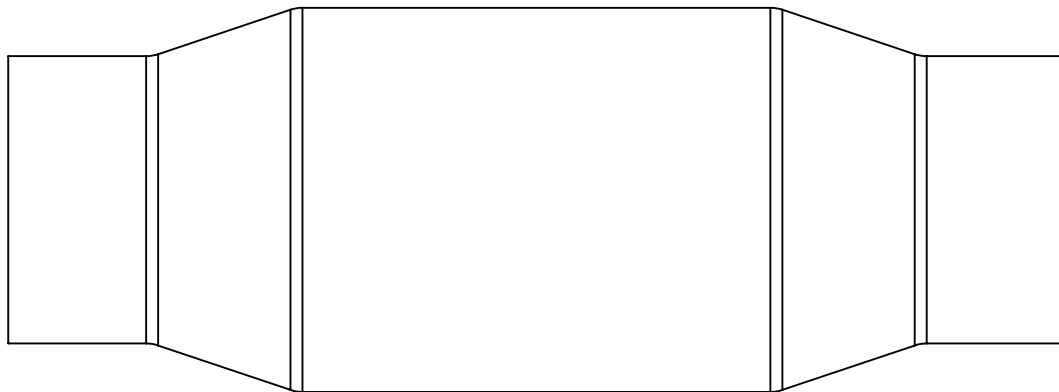
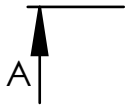
C

B

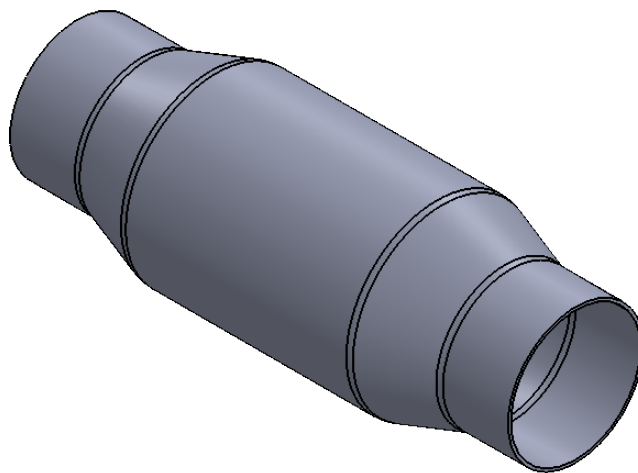
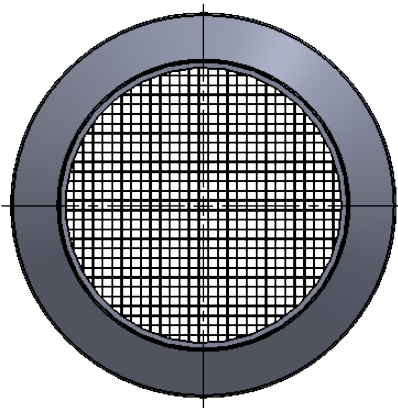
B

A

A



SECTION A-A
SCALE 1 : 2



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
SURFACE FINISH:
TOLERANCES:
LINEAR:
ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
BREAK SHARP
EDGES

SCALE: 1/2

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Matthaios Alpas		
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:
100CPSI 0.12mm

DWG NO.
100t012

A4

WEIGHT:

SCALE:1:3

SHEET 1 OF 1

4

3

2

1

4

3

2

1

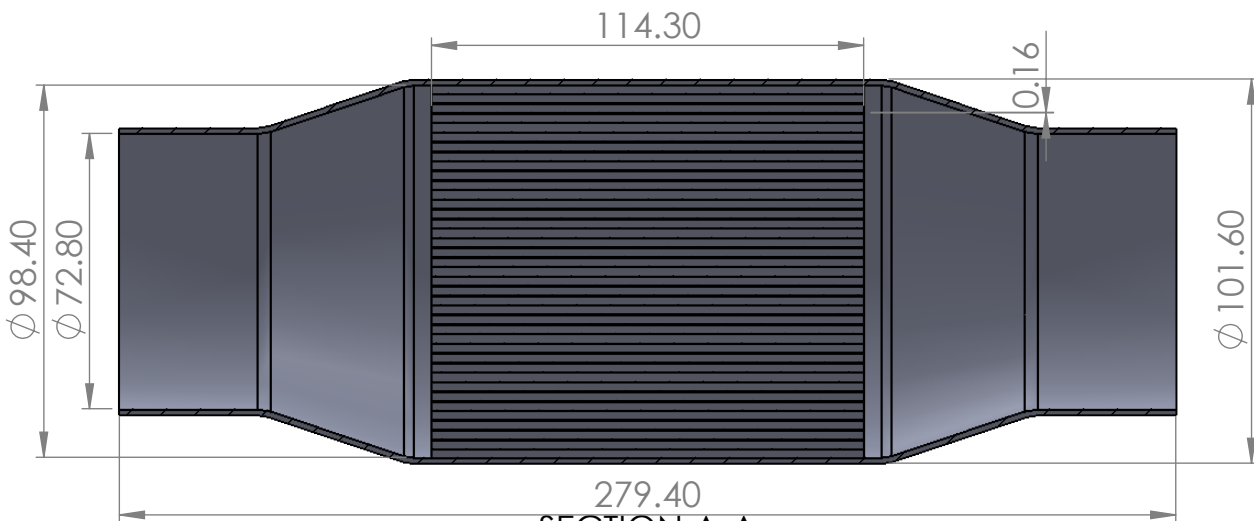
F

F



E

E



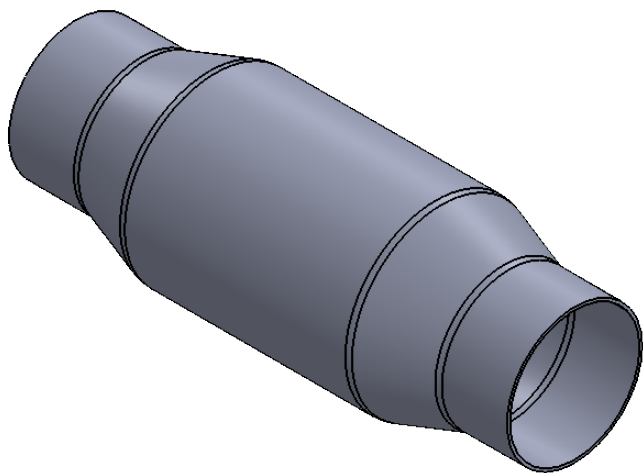
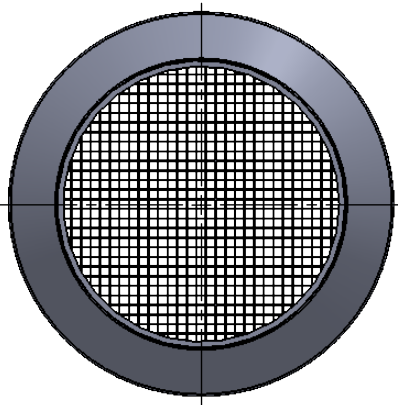
279.40
SECTION A-A
SCALE 1 : 2

D

D

C

C



B

B

UNLESS OTHERWISE SPECIFIED: DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS SURFACE FINISH: TOLERANCES: LINEAR: ANGULAR:				FINISH:	DEBURR AND BREAK SHARP EDGES	SCALE: 1/2	REVISION
NAME	SIGNATURE	DATE				TITLE: 100CPSI 0.16mm	
DRAWN	Matthaios Alpas						
CHK'D							
APPV'D							
MFG							
Q.A				MATERIAL:	DWG NO.	100t016	A4
				WEIGHT:	SCALE:1:3	SHEET 1 OF 1	

A

A

4

3

2

1

4

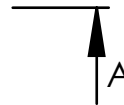
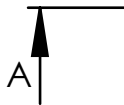
3

2

1

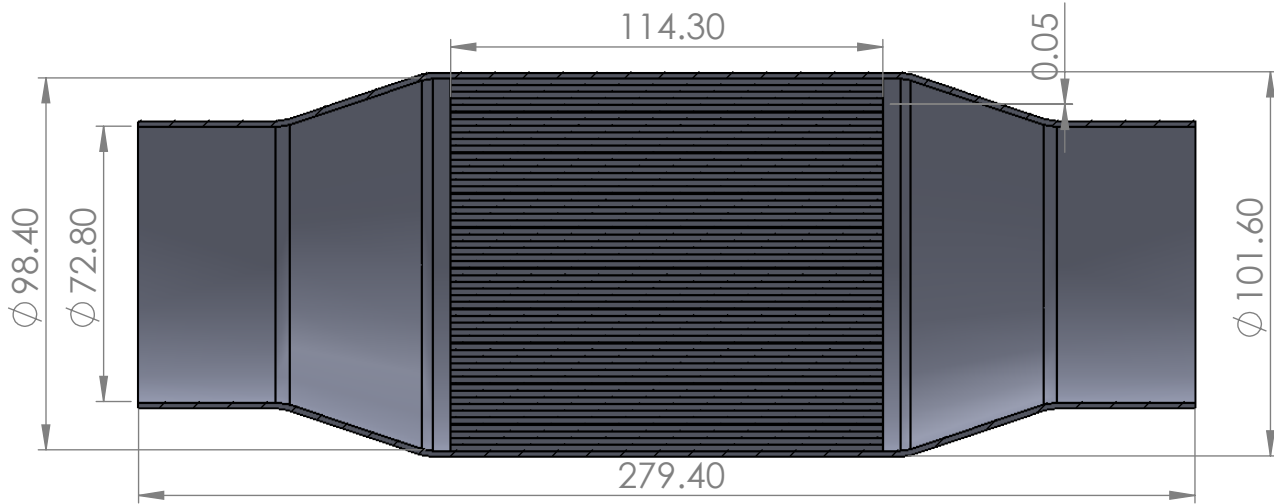
F

F



E

E



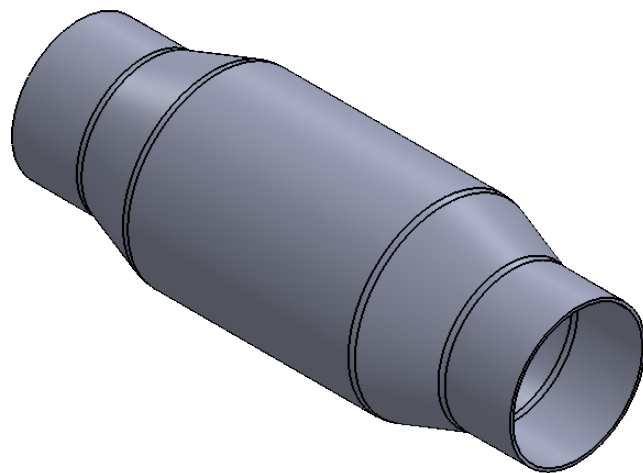
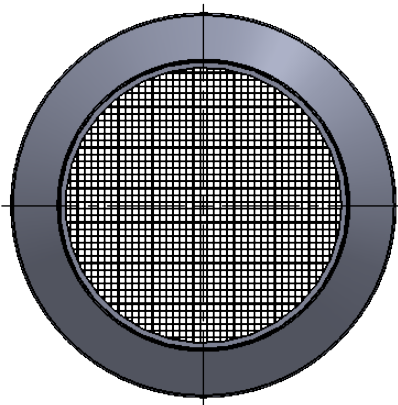
SECTION A-A
SCALE 1 : 2

D

D

C

C



B

B

UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
SURFACE FINISH:
TOLERANCES:
LINEAR:
ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
BREAK SHARP
EDGES

SCALE: 1/2

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Matthaios Alpas		
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:
200CPSI 0.05mm

MATERIAL:

DWG NO.

200t005

A4

WEIGHT:

SCALE:1:3

SHEET 1 OF 1

4

3

2

1

A

A

4

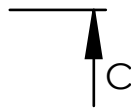
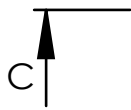
3

2

1

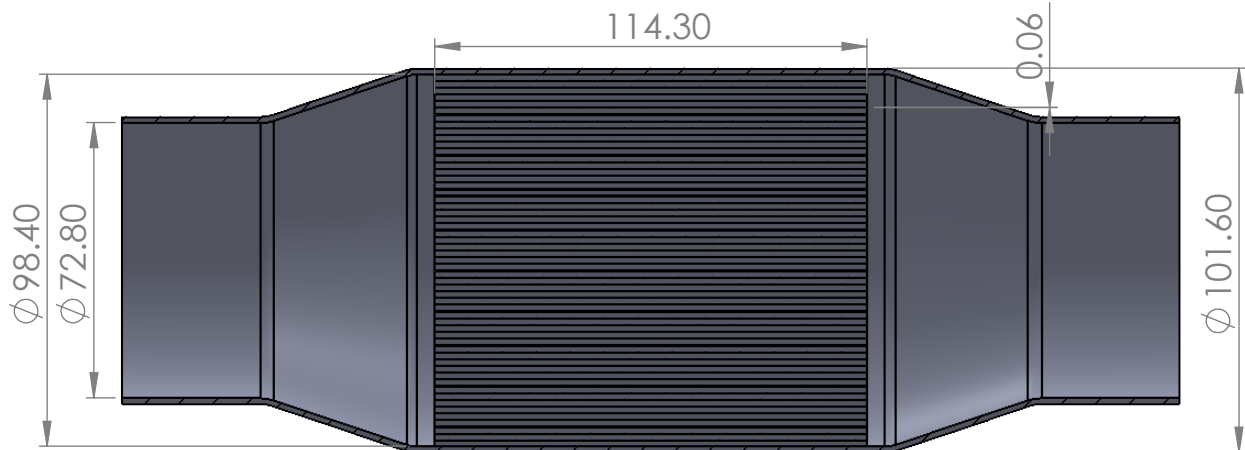
F

F



E

E



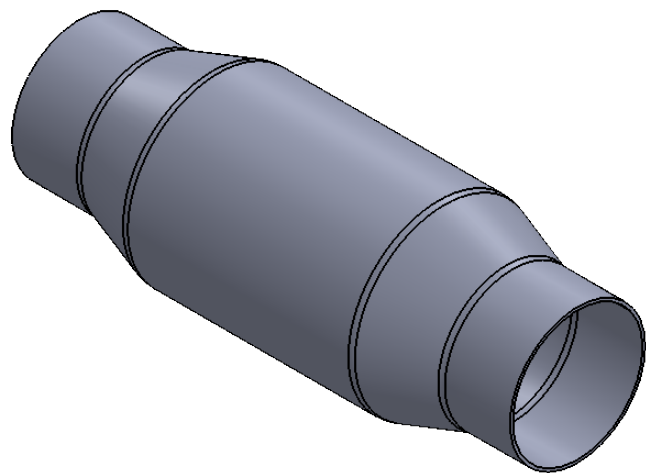
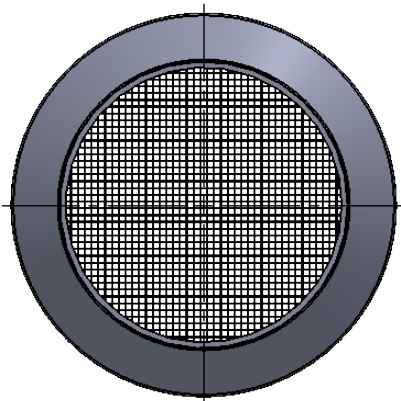
D

D

SECTION C-C
SCALE 1 : 2

C

C



B

B

UNLESS OTHERWISE SPECIFIED: DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS SURFACE FINISH: TOLERANCES: LINEAR: ANGULAR:			FINISH:		DEBURR AND BREAK SHARP EDGES		SCALE: 1/2		REVISION	
DRAWN: Matthaios Alpas			SIGNATURE:		DATE:		TITLE: 200CPSI 0.06mm		DWG NO. 200t006	
CHK'D:										
APPV'D:										
MFG:										
Q.A:										
			MATERIAL:				SCALE: 1:3		SHEET 1 OF 1	

A

A

4

3

2

1

4

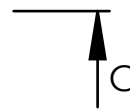
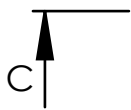
3

2

1

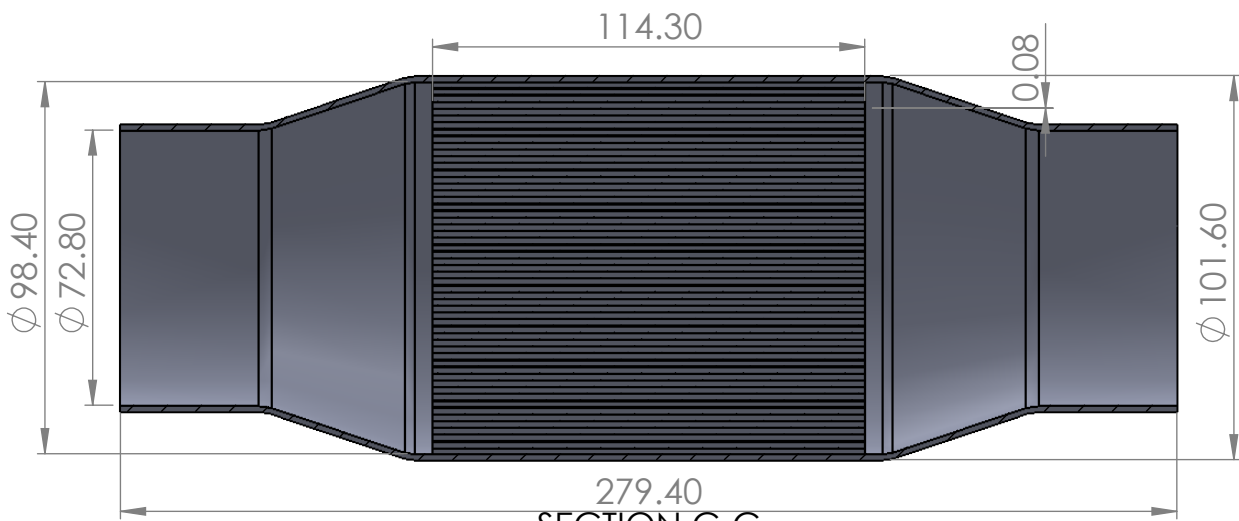
F

F



E

E

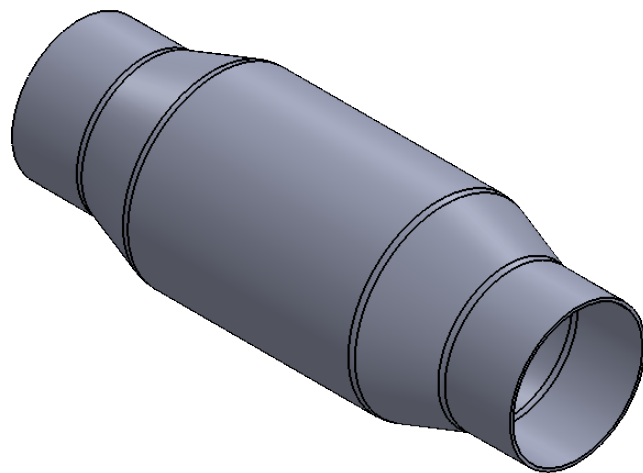
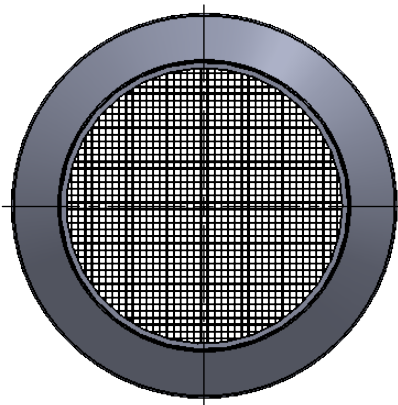


D

D

C

C



B

B

UNLESS OTHERWISE SPECIFIED: DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS SURFACE FINISH: TOLERANCES: LINEAR: ANGULAR:			FINISH:		DEBURR AND BREAK SHARP EDGES		SCALE: 1/2		REVISION	
DRAWN: Matthaios Alpas			SIGNATURE		DATE		TITLE: 200CPSI 0.08mm			
CHK'D							DWG NO. 200t008			
APPV'D							A4			
MFG							SCALE: 1:3			
Q.A					MATERIAL:		SHEET 1 OF 1			
					WEIGHT:					

A

A

4

3

2

1

4

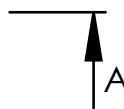
3

2

1

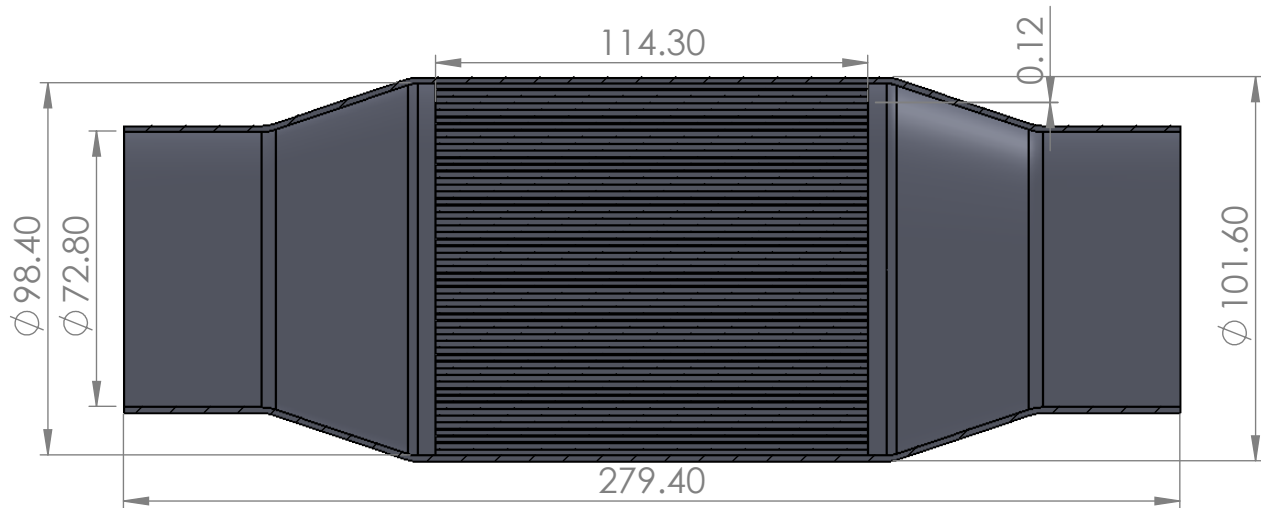
F

F



E

E



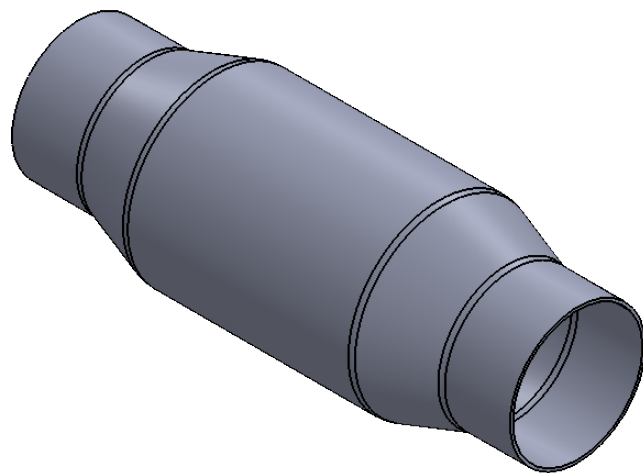
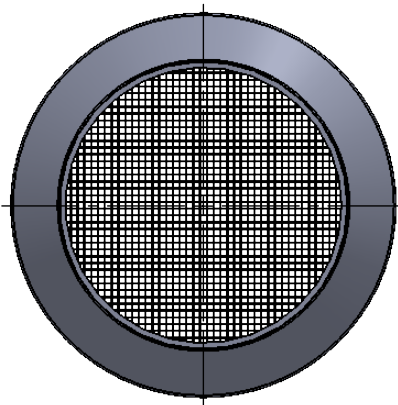
SECTION A-A
SCALE 1 : 2

D

D

C

C



B

B

UNLESS OTHERWISE SPECIFIED: DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS SURFACE FINISH: TOLERANCES: LINEAR: ANGULAR:			FINISH:	DEBURR AND BREAK SHARP EDGES	SCALE: 1/2	REVISION
NAME	SIGNATURE	DATE	TITLE: 200CPSI 0.12mm			
DRAWN Matthaios Alpas			DWG NO. 200t012			A4
CHK'D			MATERIAL:			
APPV'D			WEIGHT:			
MFG			SCALE:1:3			SHEET 1 OF 1
Q.A						

A

A

4

3

2

1

4

3

2

1

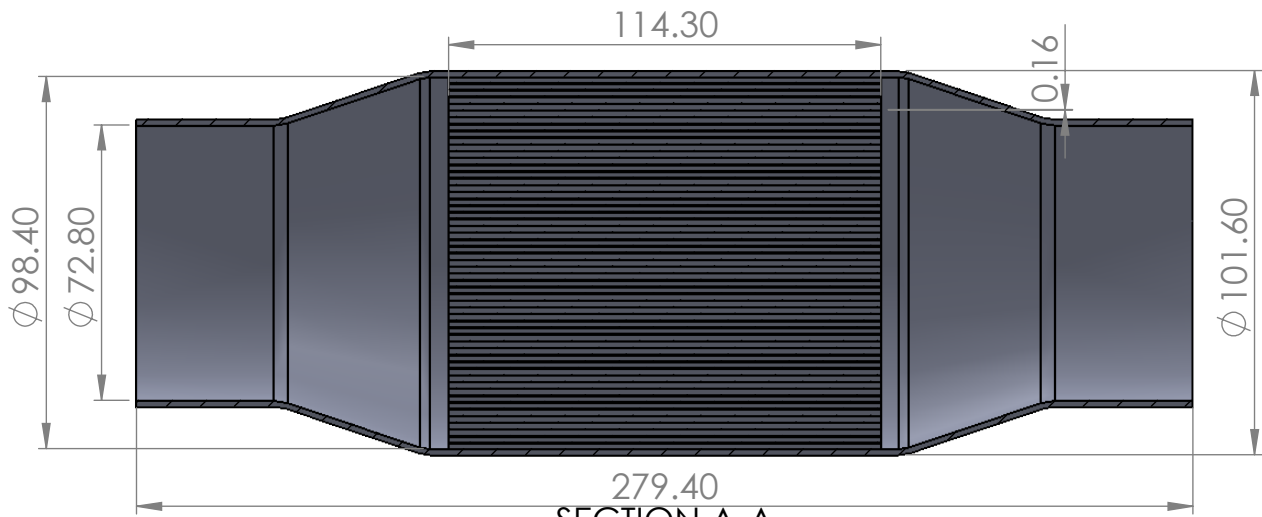
F

F



E

E



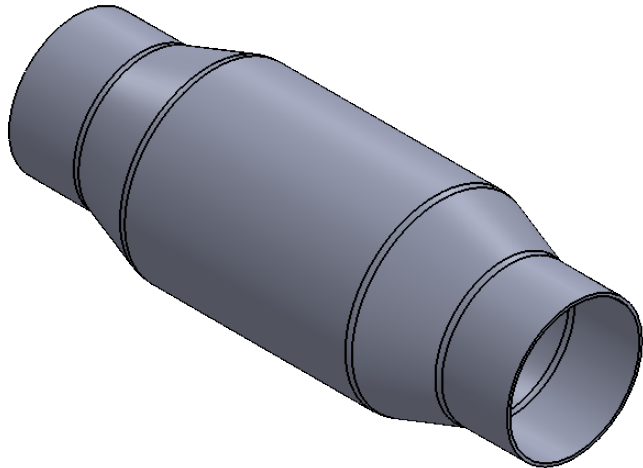
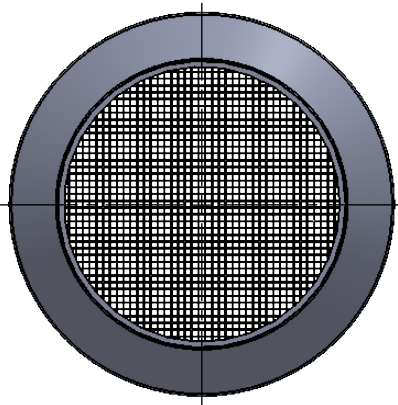
SECTION A-A
SCALE 1 : 2

D

D

C

C



B

B

UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
SURFACE FINISH:
TOLERANCES:
LINEAR:
ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
BREAK SHARP
EDGES

SCALE: 1/2

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Matthaios Alpas		
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:
200CPSI 0.16mm

DWG NO.
200t016

A4

WEIGHT:

SCALE:1:3

SHEET 1 OF 1

4

3

2

1

A

A

4

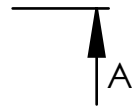
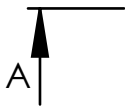
3

2

1

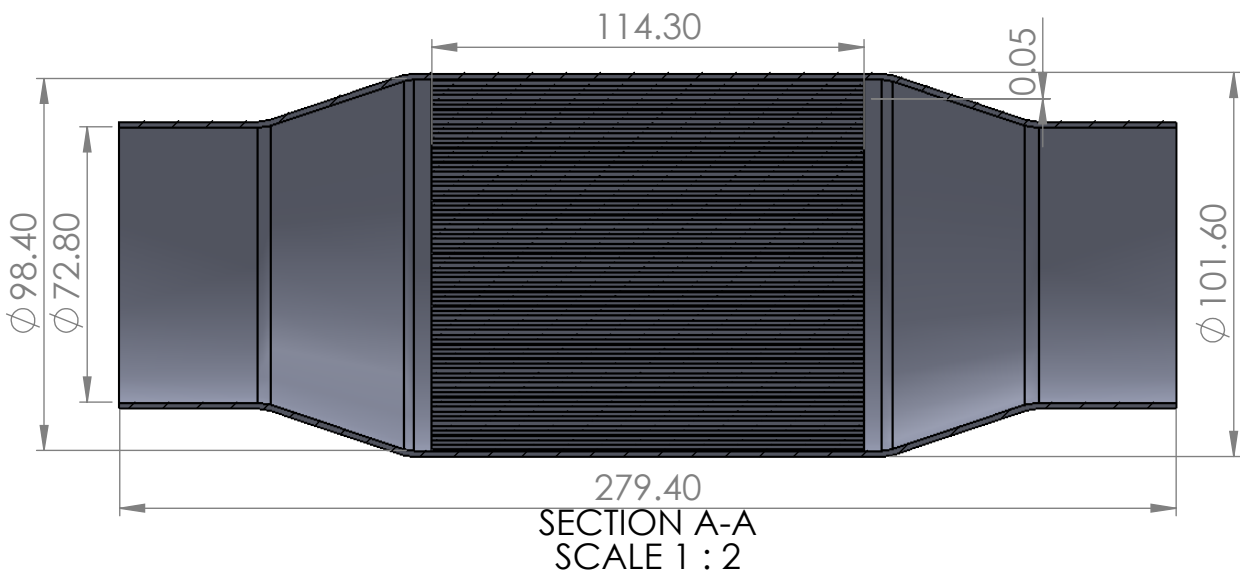
F

F



E

E

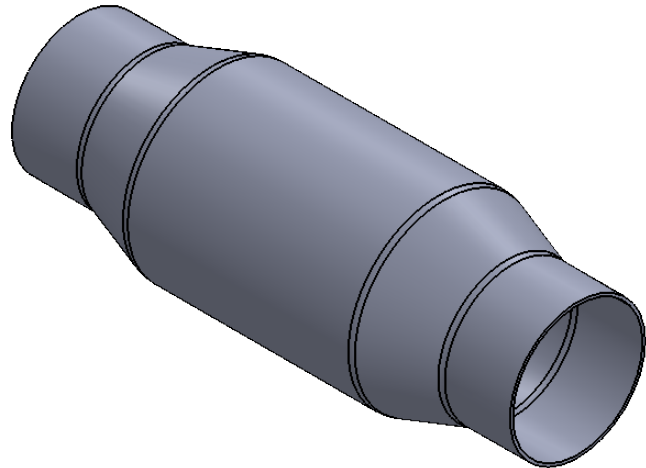
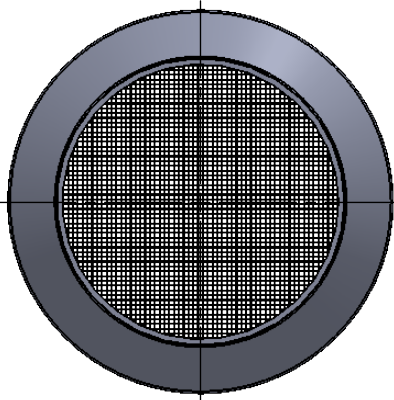


D

D

C

C



B

B

UNLESS OTHERWISE SPECIFIED: DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS SURFACE FINISH: TOLERANCES: LINEAR: ANGULAR:			FINISH:	DEBURR AND BREAK SHARP EDGES	SCALE: 1/2	REVISION
NAME	SIGNATURE	DATE	TITLE: 400CPSI 0.05mm			
DRAWN Matthaios Alpas			DWG NO. 400t005			A4
CHK'D			SCALE: 1:3			SHEET 1 OF 1
APPV'D			MATERIAL:			
MFG			WEIGHT:			
Q.A						

A

A

4

3

2

1

4

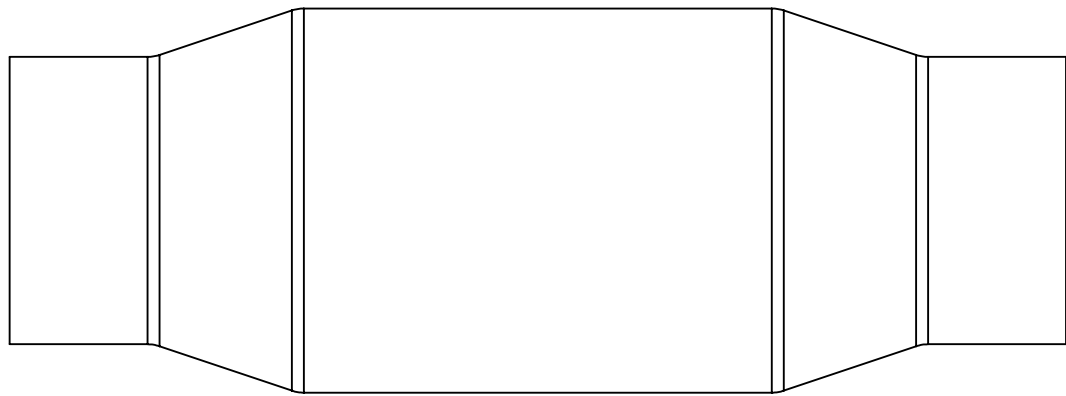
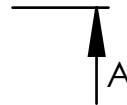
3

2

1

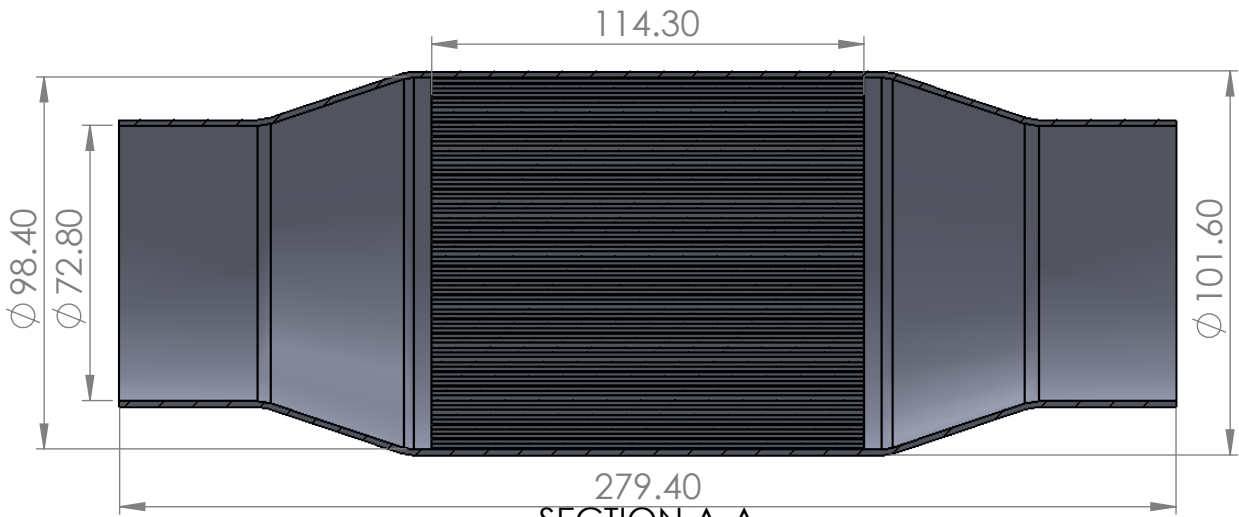
F

F



E

E



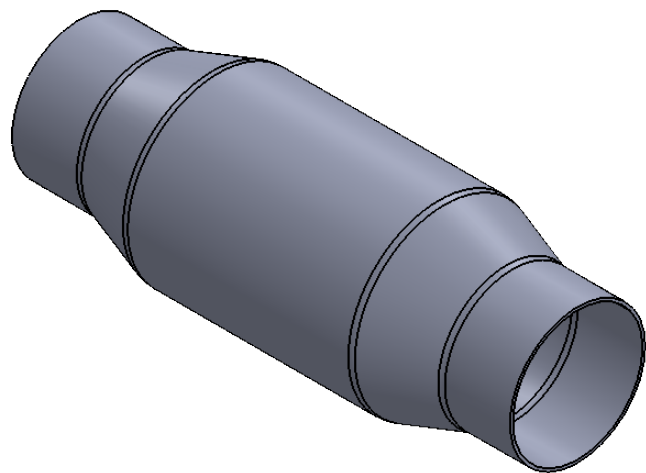
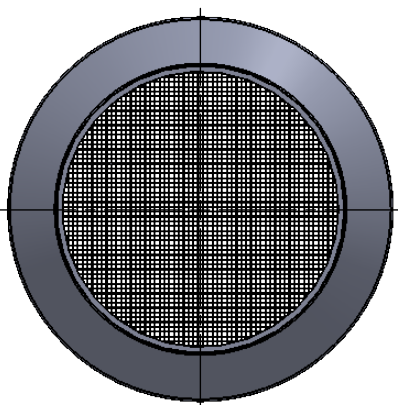
SECTION A-A
SCALE 1 : 2

D

D

C

C



B

B

UNLESS OTHERWISE SPECIFIED: DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS SURFACE FINISH: TOLERANCES: LINEAR: ANGULAR:			FINISH:	DEBURR AND BREAK SHARP EDGES	SCALE: 1/2	REVISION
NAME	SIGNATURE	DATE			TITLE: 400CPSI 0.06mm	
DRAWN	Matthaios Alpas					
CHK'D						
APP'VD						
MFG						
Q.A			MATERIAL:	DWG NO.	400t006	A4
			WEIGHT:	SCALE:1:3	SHEET 1 OF 1	

A

A

4

3

2

1

4

3

2

1

F

F

E

E

D

D

C

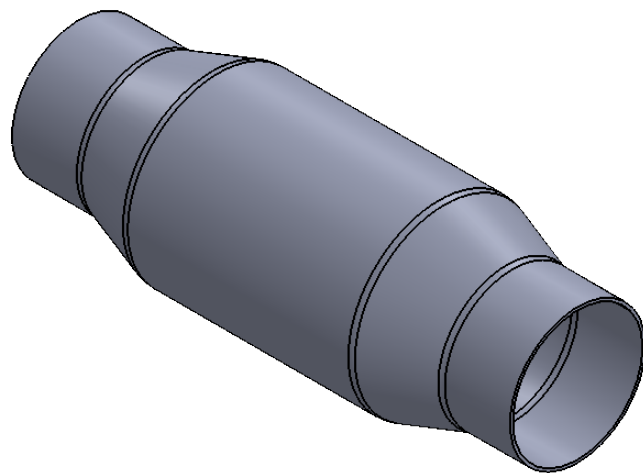
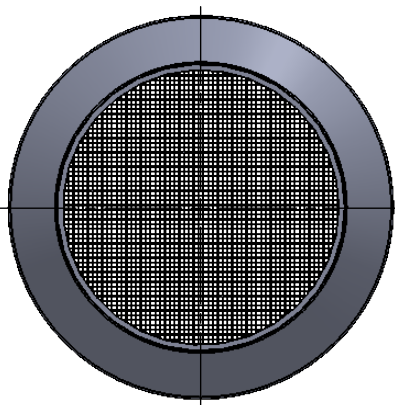
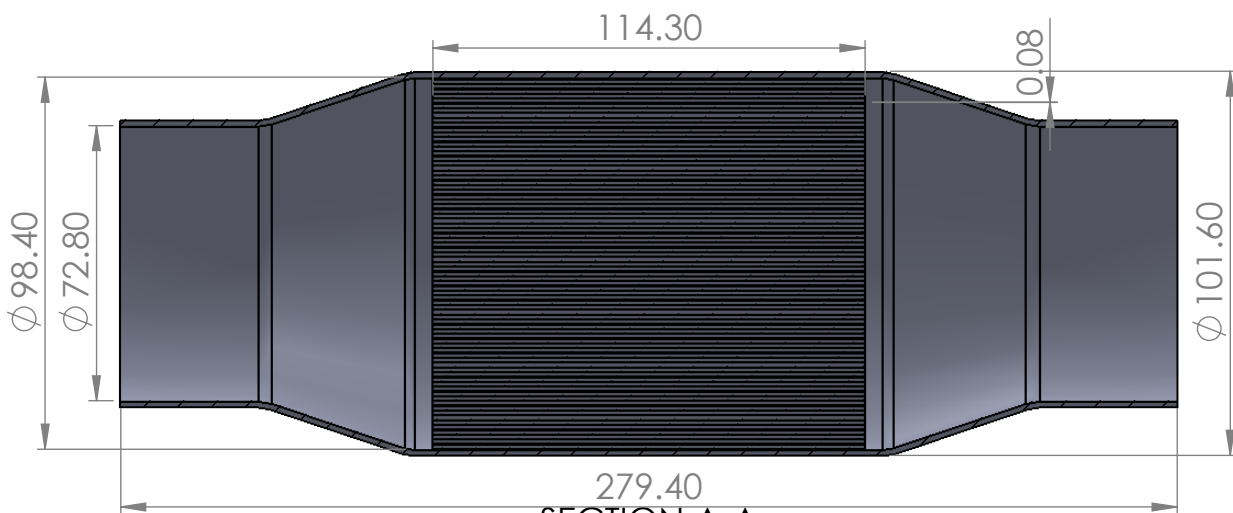
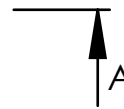
C

B

B

A

A



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED: DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS SURFACE FINISH: TOLERANCES: LINEAR: ANGULAR:			FINISH:	DEBURR AND BREAK SHARP EDGES	SCALE: 1/2	REVISION
NAME	SIGNATURE	DATE			TITLE: 400CPSI 0.08mm	
DRAWN	Matthaios Alpas					
CHK'D						
APPV'D						
MFG						
Q.A			MATERIAL:	DWG NO.	400t008	A4
			WEIGHT:	SCALE:1:3	SHEET 1 OF 1	

4

3

2

1

4

3

2

1

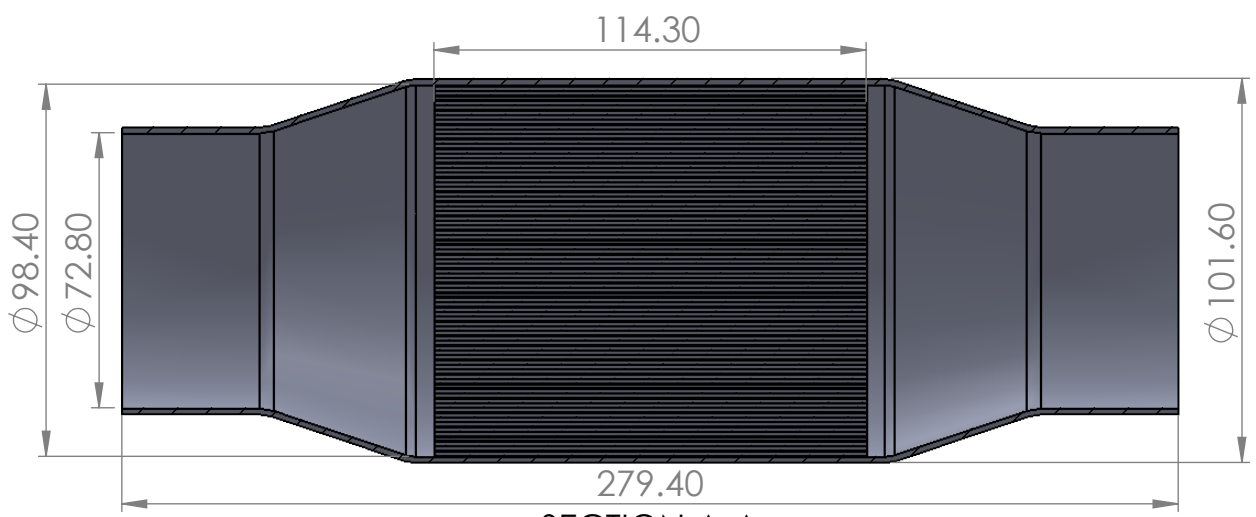
F

F



E

E



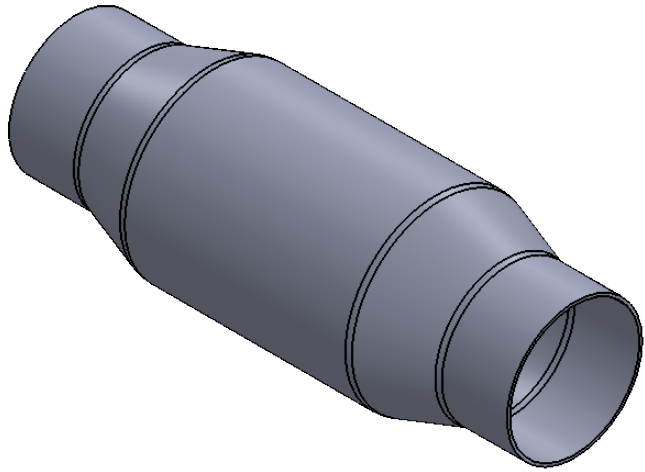
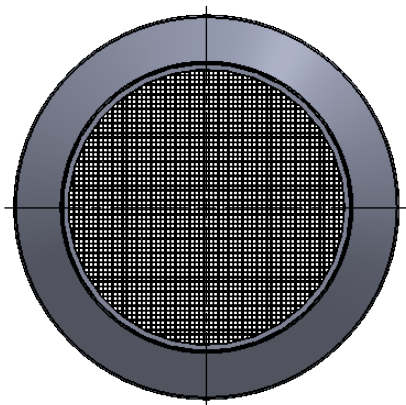
SECTION A-A
SCALE 1 : 2

D

D

C

C



B

B

UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
SURFACE FINISH:
TOLERANCES:
LINEAR:
ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
BREAK SHARP
EDGES

SCALE: 1/2

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Matthaios Alpas		
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:	400CPSI 0.12mm	
DWG NO.	400t012	A4
SCALE:1:3	SHEET 1 OF 1	

4

3

2

1

A

A

4

3

2

1

F

F

E

E

D

D

C

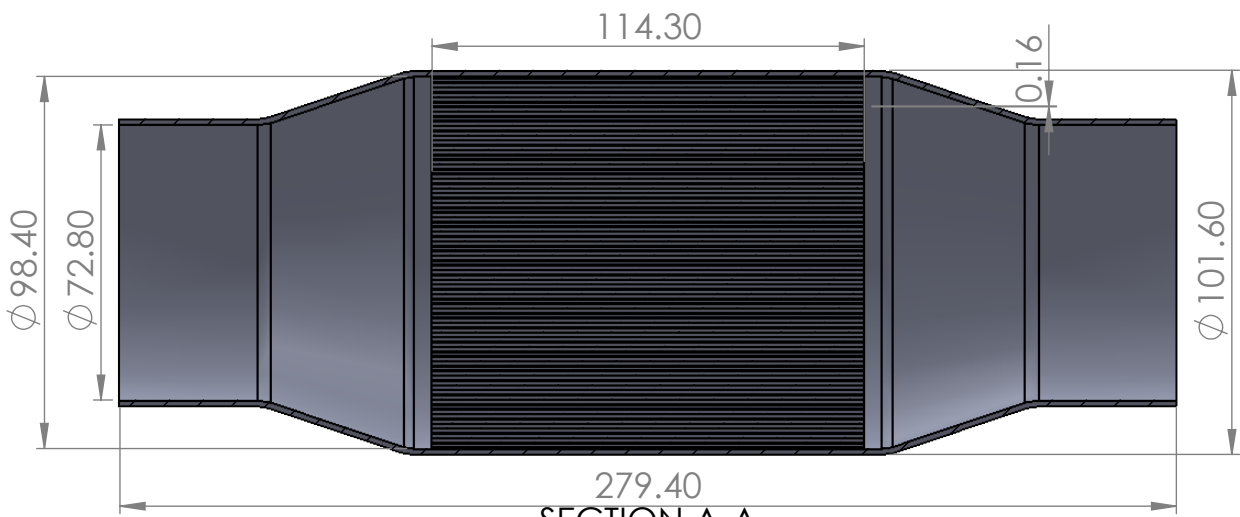
C

B

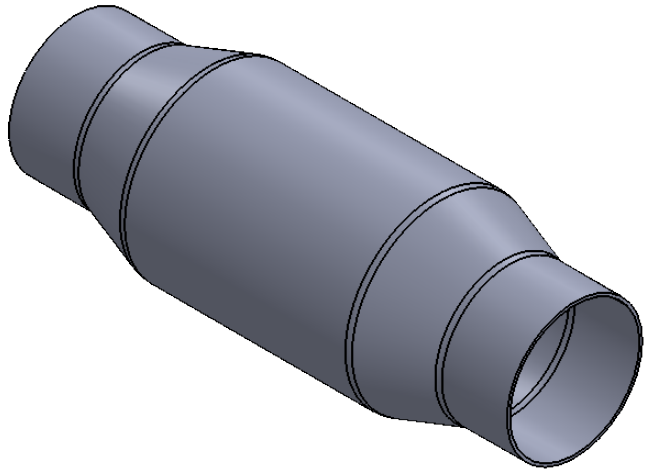
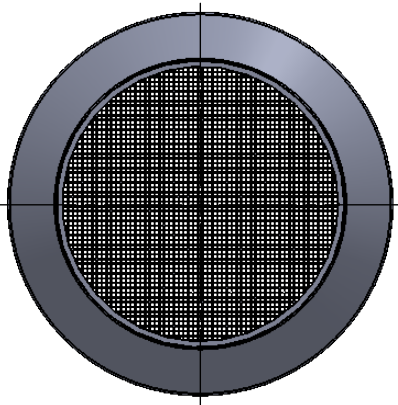
B

A

A



SECTION A-A
SCALE 1 : 2



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
SURFACE FINISH:
TOLERANCES:
LINEAR:
ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
BREAK SHARP
EDGES

SCALE: 1/2

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Matthaios Alpas		
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:
400CPSI 0.16mm

DWG NO.
400t016

SCALE:1:3

SHEET 1 OF 1

4

3

2

1