

## Nghiên cứu mô phỏng thiết kế và tính toán hiệu quả bộ xúc tác ba thành phần trên ô tô

The study simulates to design and calculate performance of three way catalyst for automobile engine

Nguyễn Thế Lương<sup>1,\*</sup>, Nguyễn Duy Tiến<sup>1</sup>, Bùi Văn Chính<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Trường Đại học Bách khoa Hà Nội

<sup>2</sup>Trường Đại học Công nghiệp Hà Nội

\*Email: [luong.nguyenthe@hust.edu.vn](mailto:luong.nguyenthe@hust.edu.vn)

Mobile: 0962886464

---

### Tóm tắt

#### Từ khóa:

Bộ xúc tác ba thành phần; CO, HC, NO<sub>x</sub>; tay ga, tốc độ.

Bài báo nghiên cứu mô phỏng thiết kế và tính toán hiệu quả bộ xúc tác ba thành phần trên động cơ ô tô Toyota Vios 1.5. Nghiên cứu mô phỏng được thực hiện trên phần mềm AVL-Boost, các điều kiện biên và điều kiện ban đầu được xác định bằng thực nghiệm trên băng thử APA100. Mô hình xây dựng đảm bảo độ tin cậy với sai lệch giữa kết quả mô phỏng và thực nghiệm nhỏ hơn 5%. Bộ xúc tác ba thành phần đã được thiết kế cho động cơ ô tô Toyota Vios 1.5 với các thông số như thể tích, lượng kim loại quý, mật độ lỗ bộ xúc tác lần lượt là 2 lít, 2,68 gam, 400 lỗ/inch<sup>2</sup>. Kết quả nghiên cứu cũng chỉ ra rằng, hiệu suất bộ xúc tác ba thành phần lắp trên động cơ ô tô cũng đã được nghiên cứu và đánh giá, hiệu suất chuyển hóa CO, HC và NO<sub>x</sub> cao nhất lần lượt là 99,9%, 70,2% và 95,6%, khi tăng tốc độ động cơ và tăng tay ga, hiệu suất xử lý CO, HC và NO<sub>x</sub> có xu hướng giảm, khi lambda động cơ nhỏ hơn một, hiệu suất chuyển hóa CO và HC giảm mạnh.

---

### Abstract

#### Keywords:

Three Way Catalysts (TWC), CO, HC, NO<sub>x</sub>, throttle, speed

This paper simulated Three Way Catalysts (TWC) performance on Toyota Vios 1.5 engine, the simulation was done on AVL-Boost software; the experiments were carried on APA100 bench to determine the initial and boundary conditions. The results showed that, the error between simulation and experiment results were less than 5%. The TWC designed for Toyota Vios 1.5 engine, the parameters of TWC as volume, amounts of noble metals, cell density was determined 2 liter, 2.68 gram and 400 cell/inch<sup>2</sup> respectively. The simulation results on Toyota Vios 1.5 engine also showed that, the highest performance of CO, HC and NO<sub>x</sub> was 99.9%, 70.2% and 95.6% respectively, when throttle and speed increased from 15% to 100%, CO, HC and NO<sub>x</sub> conversion performance trendly decreased. At lambda was smaller one, the CO and HC performance decreased strongly.

---

Ngày nhận bài: 19/7/2018

Ngày nhận bài sửa: 10/9/2018

Ngày chấp nhận đăng: 15/9/2018

---

## 1. GIỚI THIỆU

Ngày nay, số lượng các phương tiện giao thông ở nước ta tăng rất nhanh. Kéo theo đó là sự ô nhiễm môi trường do khí thải từ động cơ ô tô và xe máy. Một yêu cầu cấp thiết lúc này là giảm lượng khí thải ô nhiễm do động cơ của các phương tiện thải ra ngoài môi trường. Một trong những giải pháp hiệu quả để giảm ô nhiễm là thắt chặt các tiêu chuẩn khí thải đối với các phương tiện và sử dụng bộ xúc tác. Việt Nam đã và đang áp dụng tiêu chuẩn khí thải EURO III cho xe máy và EURO IV cho ô tô vào năm 2018, các tiêu chuẩn này ngày càng thắt chặt, giải pháp xử lý sau cửa thải là giải pháp mang lại hiệu quả cao nhất. Bộ xúc tác ba thành phần (Three Way Catalysts (TWC)) đang được sử dụng rộng rãi trên động cơ xăng để xử lý các thành phần khí thải CO, HC và NO<sub>x</sub> [1]. Trong bộ xúc tác ba thành phần, những kim loại quý đóng vai trò như chất xúc tác, bên cạnh đó còn có thêm những vật liệu có khả năng dự trữ và giải phóng ôxy để cải thiện hiệu quả bộ xúc tác ở chế độ lamđa thay đổi. Rất nhiều báo cáo nghiên cứu trên hiệu quả bộ xúc tác truyền thống đã được chỉ ra [2-4]. Ví dụ như H. He và các cộng sự đã báo cáo hiệu quả xúc tác của những kim loại quý Pd, Pt, Rh phủ trên Ce<sub>0.6</sub>Zr<sub>0.35</sub>Y<sub>0.05</sub>O<sub>2</sub>. Một vài nghiên cứu cải thiện tính bền của kim loại quý trên CeO<sub>2</sub>-ZrO<sub>2</sub> hoặc Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> cũng được quan tâm nghiên cứu [5-6]. Nghiên cứu mô phỏng về bộ xúc tác ba thành phần cũng được đề cập trong một số nghiên cứu [7-8] như Christopher Depcik và các cộng sự nghiên cứu động học phản ứng ôxy hóa CO trên hệ xúc tác Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Tại Việt Nam, hiện chỉ có một số ít các công trình được công bố, nghiên cứu của Hoàng Đình Long và các cộng sự [7-8] về hiệu quả bộ xúc tác ba thành phần khi khởi động lạnh và tối ưu hóa bộ xúc tác trên ô tô. Nguyễn Thế Lương đã nghiên cứu mô phỏng hiệu quả của bộ xúc tác ba thành phần trên xe máy khi sử dụng nhiên liệu xăng pha cồn E5-E20 [9], Nguyễn Duy Tiến và các cộng sự nghiên cứu đánh giá ảnh hưởng của mật độ lỗ và đặc tính hình học của bộ xúc tác đến tính năng kinh tế kỹ thuật của xe [10-11]. Như đã đề cập ở trên, Việt Nam đã áp dụng tiêu chuẩn EURO IV cho ô tô, điều đó đòi hỏi tất cả xe ô tô phải lắp bộ xúc tác ba thành phần, vì vậy nghiên cứu để chế tạo bộ xúc tác có hiệu quả xử lý cao là yêu cầu rất quan trọng. Bài báo này sẽ nghiên cứu mô phỏng thiết kế và tính toán hiệu quả bộ xúc tác ba thành phần trên ô tô.

## 2. MÔ HÌNH MÔ PHỎNG

### 2.1. Đối tượng mô phỏng

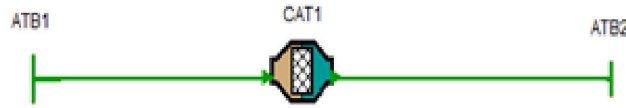
Động cơ nghiên cứu là động cơ ô tô Toyota Vios 1.5, với dung tích xy lanh 1497 cc, công suất cực đại 107 mã lực tại tốc độ 6.000 vg/ph, mô men xoắn cực đại 141 Nm tại 4200 vg/ph. Động cơ được trang bị những công nghệ tiên tiến nhất với hệ thống van biến thiên thông minh VVT-i, hệ thống phun xăng điện tử. Bộ xúc tác của hãng Emitec được sử dụng để hiệu chỉnh mô hình, bộ xúc tác có kích thước  $\phi 100 \times 250$  mm, số lỗ 400 lỗ/inch<sup>2</sup>, tỷ lệ kim loại quý Pt:Rh = 5:1, tổng lượng kim loại quý là 2,68 gam, lượng ceri sử dụng 13,4 gam, thể tích bộ xúc tác emitec 0,2lít.

### 2.2. Phương pháp nghiên cứu

Phương pháp nghiên cứu kết hợp giữa lý thuyết và thực nghiệm, nghiên cứu thực nghiệm để xác định các thông số đầu vào và điều kiện biên của mô hình cũng như hiệu chỉnh mô hình, từ mô hình đã xây dựng, nhóm tác giả tiến hành mô phỏng đánh giá các thông số như nhiệt độ bộ xúc tác, lamđa, lưu lượng dòng khí, mật độ lỗ và lượng kim loại quý đến bộ xúc tác ba thành phần, từ đó thiết kế bộ xúc tác và đánh giá hiệu quả bộ xúc tác khi lắp trên động cơ Toyota Vios 1.5.

### 2.3. Xây dựng mô hình

Mô hình mô phỏng được xây dựng trên phần mềm Boost của AVL, hình 1 chỉ ra mô hình mô phỏng, trong đó ATB1, ATB2 là phần tử điều kiện biên, CAT1 là phần tử bộ xúc tác.

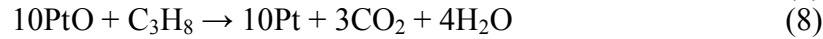
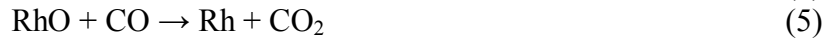
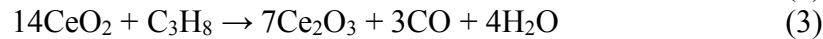


Hình 1. Mô hình bộ xử lý xúc tác ba thành phần (TWC)

Trong phần tử điều kiện biên ATB1 và ATB2: Các thông số về nồng độ các thành phần khí thải, lưu lượng khí thải, lam đa, nhiệt độ bộ xúc tác, áp suất đường thải sẽ được khai báo, để thuận lợi cho quá trình mô phỏng, khí mô phỏng bao gồm các thành phần chính như sau: CO, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, NO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, O<sub>2</sub> và N<sub>2</sub>.

Phần tử bộ xúc tác CAT1: Khai báo các thông số bộ xúc tác và các phương trình phản ứng xảy ra trong bộ xúc tác. Các phản ứng xảy ra trong bộ xúc tác ba thành phần là phản ứng phức tạp giữa pha khí với pha khí và giữa pha khí với pha rắn, trong đó phản ứng giữa pha khí với pha khí chỉ xảy ra ở nhiệt độ trên 600°C [9]. Dưới tác dụng của chất xúc tác, phản ứng giữa pha khí với pha rắn xảy ra ở nhiệt độ thấp hơn, để thuận tiện cho quá trình mô phỏng, chỉ phản những ứng giữa pha rắn với pha khí sẽ được nghiên cứu. Bộ xúc tác TWC của hãng Emitec, với các kim loại quý được sử dụng là Pt, Rh. CeO<sub>2</sub> được sử dụng để tăng khả năng dự trữ và giải phóng ôxy (OSC). Các phương trình phản ứng xảy ra trong bộ xúc tác TWC bao gồm phản ứng ôxy hóa CO, HC với ôxy và phản ứng khử NO<sub>x</sub> bởi CO.

Các phản ứng xảy ra trong bộ xúc tác TWC bao gồm các phản ứng cơ bản sau:



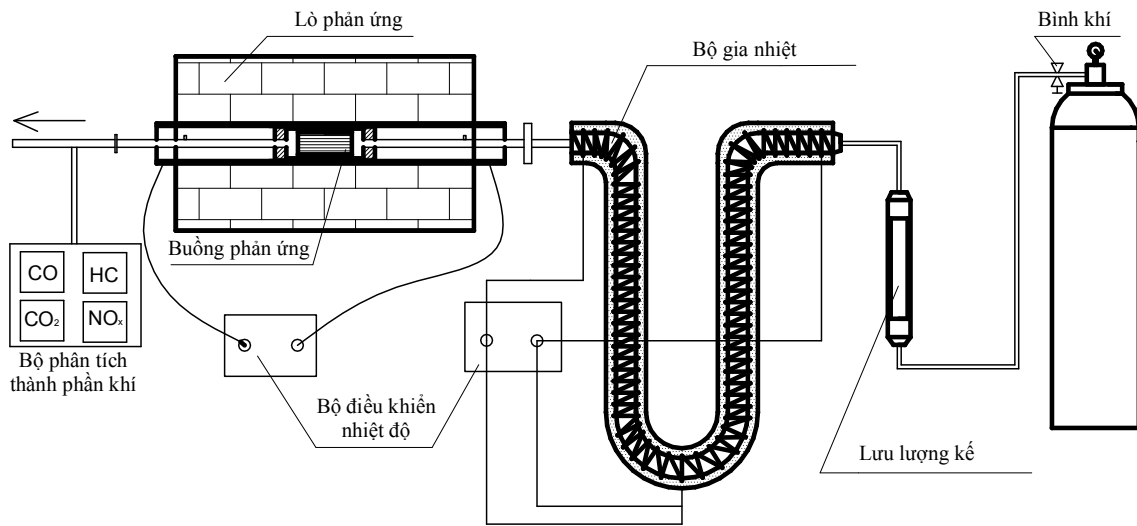
Tốc độ của phản ứng từ 1 đến phản ứng 8 được tính theo công thức của Langmuir - Hinshelwood, cụ thể như sau:

$$r_1 = K_1 \cdot e^{\frac{-E_1}{T}} \cdot y_{\text{O}_2} \cdot Z_{\text{Ce}_2\text{O}_3}; \quad r_2 = K_2 \cdot e^{\frac{-E_2}{T}} \cdot y_{\text{CO}} \cdot Z_{\text{CeO}_3}; \quad r_3 = K_3 \cdot e^{\frac{-E_3}{T}} \cdot y_{\text{C}_3\text{H}_8} \cdot Z_{\text{CeO}_3}; \quad r_4 = K_4 \cdot e^{\frac{-E_4}{T}} \cdot y_{\text{NO}} \cdot Z_{\text{Rh}}$$

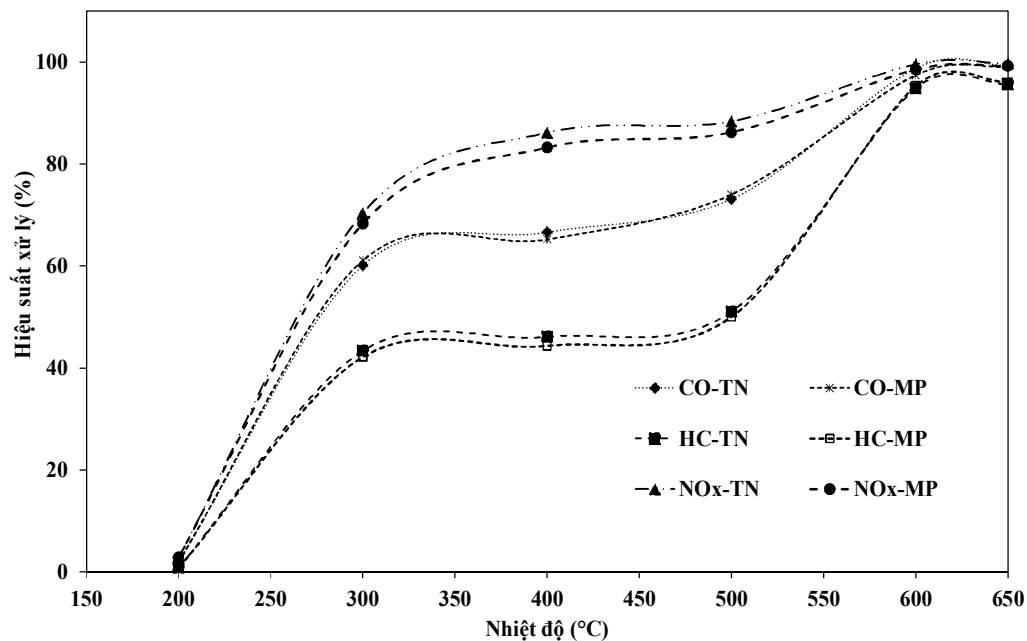
$$r_5 = K_5 \cdot e^{\frac{-E_5}{T}} \cdot y_{\text{CO}} \cdot Z_{\text{RhO}}; \quad r_6 = K_6 \cdot e^{\frac{-E_6}{T}} \cdot y_{\text{O}_2} \cdot Z_{\text{Pt}}; \quad r_7 = K_7 \cdot e^{\frac{-E_7}{T}} \cdot y_{\text{CO}} \cdot Z_{\text{PtO}}; \quad r_8 = K_8 \cdot e^{\frac{-E_8}{T}} \cdot y_{\text{C}_3\text{H}_8} \cdot Z_{\text{PtO}}$$

Trong đó: K là hằng số vận tốc, E là năng lượng hoạt hóa: K<sub>1</sub> = 5.000 kmol.m<sup>2</sup>.s, E<sub>1</sub> = 18.400 J/mol; K<sub>2</sub> = 5.200 kmol.m<sup>2</sup>.s, E<sub>2</sub> = 18.300 J/mol; K<sub>3</sub> = 5.300 kmol.m<sup>2</sup>.s, E<sub>3</sub> = 18.200 J/mol; K<sub>4</sub> = 40.000 kmol.m<sup>2</sup>.s, E<sub>4</sub> = 15.900 J/mol; K<sub>5</sub> = 24.000 kmol.m<sup>2</sup>.s, E<sub>5</sub> = 15.940 J/mol; K<sub>6</sub> = 130.000 kmol.m<sup>2</sup>.s, E<sub>6</sub> = 15.970 J/mol; K<sub>7</sub> = 150.000 kmol.m<sup>2</sup>.s, E<sub>7</sub> = 15.970 J/mol; K<sub>8</sub> = 650.000 kmol.m<sup>2</sup>.s, E<sub>8</sub> = 15.890 J/mol. T là nhiệt độ phản ứng. y<sub>O<sub>2</sub></sub> phần trăm thể tích khí ôxy. y<sub>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub></sub>, y<sub>CO</sub>, y<sub>NO</sub> là phần trăm thể tích của chất khí C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, CO, NO. Z<sub>Rh</sub>, Z<sub>Pt</sub> là số mol của Rh và Pt trên diện tích bề mặt lưu trữ của bộ xúc tác. Z<sub>RhO</sub>, Z<sub>PtO</sub> là số mol của RhO và PtO trên diện tích bề mặt lưu trữ của bộ xúc tác.

## 2.4. Hiệu chỉnh mô hình



**Hình 2.** Hệ thống thiết bị thí nghiệm dùng để hiệu chuẩn mô hình mô phỏng



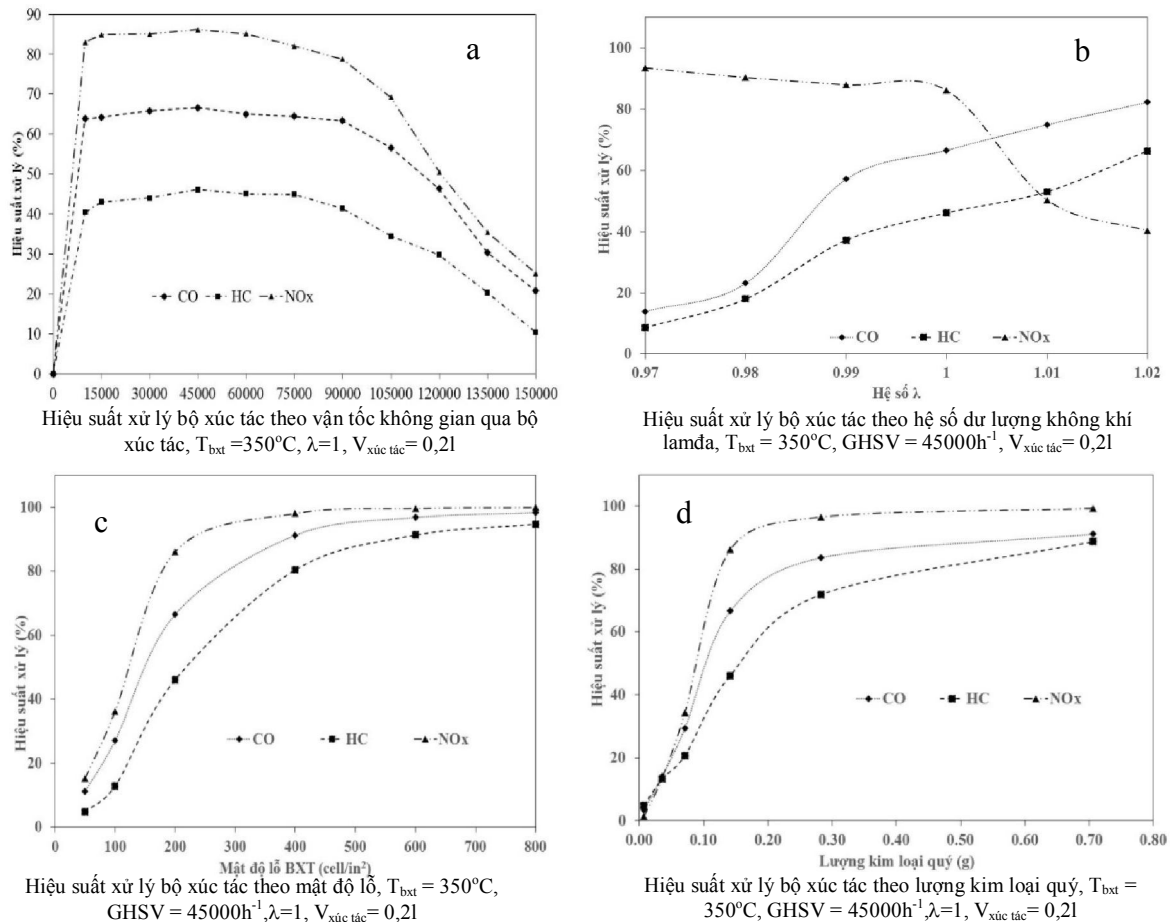
**Hình 3.** So sánh hiệu quả bộ xúc tác TWC mô phỏng và thực nghiệm, GHSV =  $45000\text{h}^{-1}$ ,  $\lambda = 1$

Như ở trên đã nghiên cứu xây dựng mô hình mô phỏng bộ xúc tác, việc hiệu chuẩn mô hình là cần thiết để đảm bảo độ chính xác của mô hình, bộ xúc tác thương mại của hãng Emitec với đầy đủ thông số kỹ thuật như đã trình bày trong phần đối tượng nghiên cứu. Hình 2 chỉ ra hệ thống thí nghiệm dùng để hiệu chuẩn mô hình mô phỏng, bộ xúc tác Emitec được đặt vào trong buồng phản ứng, buồng phản ứng được gia nhiệt bởi lò phản ứng. Khí mô phỏng trong bình khí có thành phần CO, HC và  $\text{NO}_x$  với nồng độ lần lượt là 9863 ppm, 792 ppm và 6484 ppm,  $\lambda$  được điều khiển thông qua thay đổi nồng độ oxy trong bình khí. Khí mô phỏng từ bình sẽ đi qua lưu lượng kế để

điều chỉnh lưu lượng dòng khí, khí sau khi đi qua lưu lượng kế sẽ được đưa đến bộ gia nhiệt để gia nhiệt dòng khí thải đến nhiệt độ mong muốn. Khí mô phỏng sau khi được gia nhiệt sẽ được đưa vào buồng phản ứng, nhiệt độ buồng phản ứng thay đổi từ 200°C đến 650°C. Khí mô phỏng đi vào buồng phản ứng, tại đây xuất hiện các phản ứng trong bộ xúc tác, khí mô phỏng sau khi qua bộ xúc tác sẽ được đưa đến bộ phân tích khí thải CEBII của AVL để phân tích nồng độ các thành phần khí CO, HC và NO<sub>x</sub> (hình 2). Thí nghiệm được thực hiện ở nhiệt độ từ 200°C đến 650°C, kết quả thử nghiệm thu được sẽ được sử dụng để hiệu chỉnh mô hình.

Hình 3 chỉ ra kết quả đánh giá hiệu suất bộ xúc tác trong trường hợp mô phỏng và thực nghiệm tại, GHSV = 45000h<sup>-1</sup>, lamda = 1, nhiệt độ bộ xúc tác thay đổi từ 200 đến 650°C. Kết quả chỉ ra rằng, hiệu suất xử lý của bộ xúc tác với thành phần NO<sub>x</sub>, HC và CO đạt tương ứng khoảng 94,48 và 56%, sai lệch kết quả mô phỏng (MP) và thực nghiệm (TN) < 5%, sai lệch trung đối với thành phần CO là khoảng 0,73%, với thành phần HC là khoảng 3,34% và với thành phần NO<sub>x</sub> là khoảng 3,59%.

### 2.5. Mô phỏng đánh giá ảnh hưởng của vận tốc không gian, lamda, mật độ lỗ, lượng kim loại quý đến hiệu suất bộ xúc tác



**Hình 4.** Hiệu suất xử lý của bộ xúc tác theo vận tốc không gian, lamda, mật độ lỗ và lượng kim loại quý

Tại các chế độ mô phỏng, hiệu suất bộ xúc tác phụ thuộc rất nhiều vào vận tốc không gian, lamda (lưu lượng dòng khí thải trên một thể tích bộ xúc tác (1/h)), mật độ lỗ, lượng kim loại quý,

sau đây nhóm nghiên cứu sẽ đi đánh giá cụ thể về các thông số ảnh hưởng trên đến hiệu quả bộ xúc tác ba thành phần. Hình 4a chỉ ra kết quả mô phỏng hiệu quả bộ xúc tác theo vận tốc không gian của dòng khí tại  $T_{bxt} = 350^{\circ}\text{C}$  và  $\lambda = 1$ , khi tăng vận tốc không gian từ  $0-45000\text{h}^{-1}$ , hiệu suất chuyển hóa CO, HC và  $\text{NO}_x$  tăng từ từ và đạt cao nhất lần lượt là 66,61%, 46,12% và 86,16%, tiếp tục tăng vận tốc không gian thì hiệu suất chuyển hóa CO, HC và  $\text{NO}_x$  giảm dần, hiệu suất giảm mạnh khi vận tốc dòng khí lớn hơn  $90000\text{h}^{-1}$ . Nguyên nhân của hiện tượng này là do khi tăng vận tốc không gian, các phân tử khí khuếch tán đều trên bề mặt bộ xúc tác, hiệu suất chuyển hóa tăng nhanh, tiếp tục tăng vận tốc, các phân tử khí phân tán vào cấu trúc lỗ rỗng của lớp vật liệu trung gian, hiệu suất chuyển hóa tiếp tục tăng nhưng với tốc độ chậm hơn, tiếp tục tăng lưu lượng, lúc này quá trình khuếch tán và thời gian tiếp xúc của các phân tử khí với vật liệu xúc tác giảm đi, hiệu suất xử lý giảm dần. Hình 4b chỉ ra kết quả mô phỏng ảnh hưởng của lamda đến hiệu suất xử lý của bộ xúc tác tại  $T_{bxt} = 350^{\circ}\text{C}$  và  $\text{GHSV} = 45000\text{h}^{-1}$ , hiệu suất bộ xúc tác đạt cao nhất trong vùng lamda bằng 1, khi lamda lớn hơn 1, lượng oxy trong khí thải tăng, tạo môi trường thuận lợi để xuất hiện các phản ứng oxy hóa của CO và HC, vì vậy hiệu suất xử lý CO và HC tăng, trong khi môi trường khử giảm làm cho hiệu suất xử lý  $\text{NO}_x$  giảm, khi lamda nhỏ hơn một, môi trường hóa oxy hóa giảm, làm cho hiệu suất xử lý CO và HC giảm nhanh trong khi hiệu suất xử lý  $\text{NO}_x$  tăng.

Đồ thị hình 4c chỉ ra hiệu suất bộ xúc tác phụ thuộc mật độ lỗ tại  $T_{bxt} = 350^{\circ}\text{C}$ ,  $\text{GHSV} = 45000\text{h}^{-1}$  và  $\lambda = 1$ , kết quả cho thấy, khi mật độ lỗ tăng từ 200 đến 400 lỗ/inch<sup>2</sup> thì hiệu suất chuyển hóa tăng mạnh, tiếp tục tăng mật độ lỗ từ 400 lên 800 lỗ/inch<sup>2</sup> thì hiệu suất tăng không nhiều. Nguyên nhân là do mật độ lỗ của BXT sẽ quyết định đến diện tích phản ứng của khí thải với kim loại quý, khi mật độ lỗ càng lớn có nghĩa diện tích phản ứng càng lớn, lượng khí thải tác dụng với chất xúc tác càng lớn dẫn tới hiệu suất chuyển hóa càng cao. Khi mật độ lỗ lớn hơn 400 lỗ/inch<sup>2</sup>, về lý thuyết có thể tăng diện tích của bề mặt phản ứng nhưng khi đó kích thước của các lỗ càng bé, vì vậy không gian phản ứng tăng không đáng kể, chính vì vậy hiệu suất chuyển hóa khí thải tăng không nhiều.

Hình 4d chỉ ra hiệu suất xử lý khí thải theo lượng kim loại quý tại  $T_{bxt} = 350^{\circ}\text{C}$ ,  $\text{GHSV} = 45000\text{h}^{-1}$  và  $\lambda = 1$ , kết quả chỉ ra rằng, khi tăng lượng kim loại quý Pt và Rh từ 0 lên 0,3gam, hiệu suất chuyển hóa CO, HC và  $\text{NO}_x$  tăng mạnh, tiếp tục tăng lượng kim loại quý thì hiệu quả xử lý của CO,  $\text{NO}_x$  và HC tăng chậm. Nguyên nhân dẫn đến điều này là khi lượng kim loại quý được phủ đều và phù hợp trên bề mặt phản ứng, tạo điều kiện đủ không gian và thời gian cho khí thải tiếp xúc với chất xúc tác, dẫn đến quá trình chuyển hóa tối ưu. Khi tiếp tục tăng lượng kim loại quý thì hiệu suất gần như không đổi do lượng kim loại quý được phân bố đều trên bề mặt đã đạt tới giới hạn, vì vậy hiệu suất chuyển hóa tăng chậm. Hơn nữa khi tăng lượng kim loại quý lên quá lớn sẽ làm tăng diện tích chiếm chỗ, làm giảm bề mặt tiếp xúc, vì vậy cũng ảnh hưởng đến hiệu suất bộ xúc tác.

### 3. THIẾT KẾ VÀ ĐÁNH GIÁ BỘ XÚC TÁC BA THÀNH PHẦN CHO Ô TÔ

#### 3.1. Yêu cầu thiết kế

Bộ xúc tác có hiệu quả xử lý trên 80% các thành phần khí thải CO, HC và  $\text{NO}_x$ , kích thước bộ xúc tác nhỏ gọn, phù hợp lắp trên ô tô Toyota Vios.

#### 3.2. Mô phỏng xác định thông số kỹ thuật bộ xúc tác ba thành phần cho động cơ ô tô Toyota Vios

Mục 2.4 đã đánh giá các thông số ảnh hưởng của bộ xúc tác đến hiệu suất chuyển đổi, hình 4d cho thấy với bộ xúc tác có mật độ lỗ 400 lỗ/inch<sup>2</sup> cho hiệu suất cao, ít gây cản trên đường

ồng và dễ chế tạo, vì vậy nhóm tác giả đã lựa chọn mật độ lỗ là 400 lỗ/inch<sup>2</sup>. Sau đây nhóm nghiên cứu sẽ đi xác định các thông số thể tích bộ xúc tác, diện tích phản ứng, lượng kim loại quý bộ xúc tác động cơ Toyota Vios 1.5.

Lượng kim loại quý cần thiết trên 1 lít bộ xúc tác động cơ ô tô Toyota Vios được xác định dựa vào công thức sau:

$$m_{klQ \text{ ô tô}} = \frac{m_{klQ \text{ Emitec}}}{S_{P\ddot{u}ng \text{ Emitec}}} \times S_{P\ddot{u}ng \text{ ô tô}} \quad (1)$$

Trong đó:  $m_{klQ \text{ Emitec}}$ : Lượng kim loại quý cho 1 lít bộ xúc tác Emitec,  $S_{P\ddot{u}ng \text{ Emitec}}$ : Diện tích phản ứng có trong 1 lít BXT Emitec,  $S_{P\ddot{u}ng \text{ ô tô}}$ : Diện tích phản ứng có trong 1 lít bộ xúc tác Emitec, sau đây sẽ đi tính toán các thông số trên. Hình 4d, chỉ ra lượng kim loại quý của bộ xúc tác Emitec với thể tích 0,2 lít, kết quả cho thấy hiệu suất bộ xúc tác đạt trên 80% lượng kim loại quý sử dụng là 0,2gam (Pt và Rh). Tương ứng với đó, khi thể tích bộ xúc tác Emitec 1 lít thì lượng kim loại quý cần thiết là 1gam (Pt : Rh = 5 : 1), theo kinh nghiệm lượng ceri sử dụng là 5gam.

Diện tích phản ứng có trong một lít bộ xúc tác thay đổi khi ta thay đổi mật độ lỗ của bộ xúc tác. Dựa theo lý thuyết về lỗ rỗng đã được xây dựng trong phần mềm, phần mềm sẽ tính toán ra được  $S_{P\ddot{u}ng \text{ Emitec}}$  và  $S_{P\ddot{u}ng \text{ ô tô}}$  lần lượt là 1975,14 m<sup>2</sup> và 2645,67 m<sup>2</sup>. Thay các thông số vừa tìm được vào công thức (1), ta xác định được lượng kim loại quý cần thiết trên một lít thể tích bộ xúc tác ô tô là 1,34 g/l.

Để xác định được thể tích bộ xúc tác cho động cơ ô tô vios 1.5, từ thông số kỹ thuật của động cơ kết hợp với điều kiện làm việc thực tế, hiệu suất bộ xúc tác đạt cao nhất khi động cơ làm việc ở chế độ tải nhỏ và trung bình, vì vậy lưu lượng khí thải động cơ thử nghiệm làm việc ở chế độ tải nhỏ và trung bình trong khoảng 20 g/s. Hình 5a chỉ ra ảnh hưởng của vận tốc không gian của dòng khí tới hiệu suất chuyển hóa bộ xúc tác, hiệu suất chuyển hóa cao nhất tại vận tốc không gian của dòng khí là 45000 h<sup>-1</sup>, vận tốc không gian được tính bằng vận tốc dòng khí chia cho thể tích bộ xúc tác. Từ các giá trị ở trên, nhóm nghiên cứu xác định được thể tích bộ xúc tác động cơ ô tô Toyota Vios trong khoảng 1,5 lít đến 2 lít, để tăng khả năng làm việc ở các chế độ tải lớn, nhóm nghiên cứu chọn thể tích BXT là 2 lít. Từ đó, lượng kim loại cần thiết cho bộ xúc tác động cơ Vios được thể 2,68 gam, lượng CeO<sub>2</sub> và Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> chọn theo kinh nghiệm lần lượt là 13 và 210 gam. Bảng 1 chỉ ra thông số kỹ thuật bộ xúc tác động cơ Vios 1.5 sau khi thiết kế.

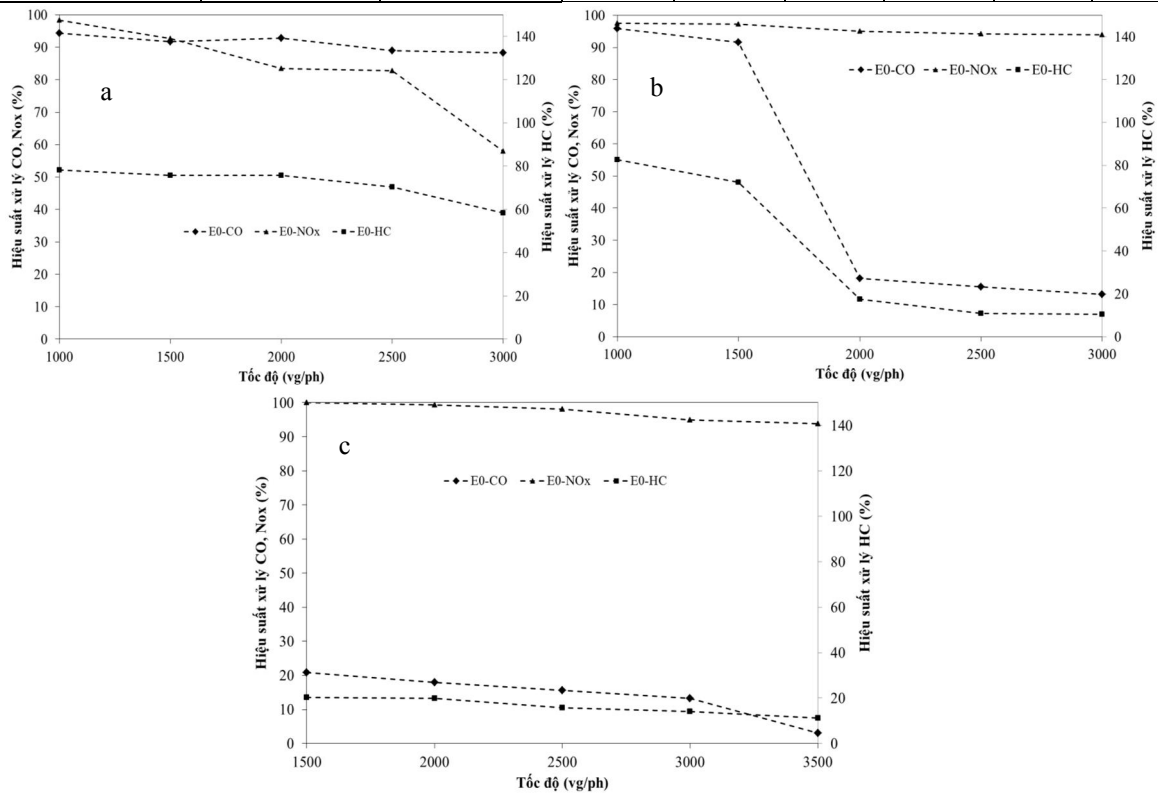
**Bảng 1.** Bảng thông số kỹ thuật cho BXT ô tô VIOS

Thông số	Giá trị	Đơn vị
Thể tích BXT	2	l
Mật độ lỗ	400	lỗ/inch <sup>2</sup>
Khối lượng riêng BXT	1700	kg/m <sup>3</sup>
Độ dày lớp vỏ	0,001	m
Thể tích của các lỗ rỗng	1,412	l
Kim loại quý sử dụng	Pt, Rh	
Khối lượng Pt + Rh sử dụng	2,68	g
Tỉ lệ về số mol Pt : Rh	2 : 1	
Khối lượng Ce sử dụng	13	g
Lượng $\gamma$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	210	g

### 3.3. Mô phỏng đánh giá hiệu quả bộ xúc tác ba thành phần trên động cơ ô tô VIOS

**Bảng 2.** Kết quả đo nồng độ, lưu lượng khí thải, nhiệt độ khí thải và lamda động cơ Toyota Vios 1.5 tại 15%, 30%, 50% và 100% tay ga

Vị trí tay ga (%)	n (vg/ph)	G <sub>kt</sub> (kg/h)	Nhiệt độ khí thải	Lambda	CO (ppm)	CO <sub>2</sub> (ppm)	HC (ppm)	NO <sub>x</sub> (ppm)
15	1000	18,94	307	1,01	6851	137226	3403	491
	1500	19,64	326	1,02	5378	143102	3231	334
	2000	19,19	371	1,01	6375	140428	2116	177
	2500	19,40	412	1,01	7050	140034	1781	71
	3000	18,60	414	1,01	8565	124726	532	34
30	1000	29,76	588	1,00	4866	145718	3086	1536
	1500	42,20	719	1,00	4444	146484	2530	1902
	2000	47,69	720	0,86	60090	124948	3815	640
	2500	51,76	750	0,84	64296	123965	3802	426
	3000	53,28	743	0,84	66917	119948	3953	453
100	1500	42,16	652	0,86	64968	120781	4083	343
	2000	53,20	709	0,85	57056	126874	3836	365
	2500	71,34	764	0,84	62421	123100	3887	314
	3000	77,56	774	0,83	68052	118810	4221	251
	3500	94,22	794	0,82	73889	114019	4421	189



**Hình 5.** Hiệu suất xử lý của bộ xúc tác theo tốc độ tại 15% (a), 30% (b) và 100% (c) tay ga



Để mô phỏng hiệu quả bộ xúc tác trên động cơ Toyota Vios 1.5, các thông số đầu vào của động cơ cần được xác định bằng thực nghiệm, bảng 2 chỉ ra kết quả đo nồng độ, lưu lượng khí thải, nhiệt độ khí thải và lamđã động cơ tại 15%, 30%, 50% và 100% tay ga khi thử nghiệm trên băng thử nhiều xy lanh APA100 của AVL, thiết bị phân tích khí thải CEB II, lamđã Bosch LSU 4.9, cảm biến nhiệt độ can K.

Hình 5 chỉ ra hiệu suất xử lý của bộ xúc tác theo tốc độ động cơ tại 15%, 30% và 100% tay ga. Tại tốc độ động cơ 1000 vg/ph, hiệu suất chuyển hóa CO, HC và NO<sub>x</sub> cao nhất lần lượt là 99,9%, 70,2% và 95,6% (hình 5a). Khi càng tăng tốc độ động cơ (vận tốc không gian tăng), hiệu suất chuyển hóa CO, HC và NO<sub>x</sub> có xu hướng giảm, nguyên nhân của hiện tượng này là do khi tăng tốc độ động cơ, vận tốc không gian tăng làm cho thời gian tiếp xúc giữa vật liệu xúc tác và khí thải giảm (hình 4a), vì vậy hiệu suất chuyển hóa CO, HC và NO<sub>x</sub> có xu hướng giảm. Hình 5b và 5c chỉ ra hiệu suất xử lý của bộ xúc tác tại 30% và 100% tay ga, kết quả cho thấy hiệu suất xử lý CO, HC và NO<sub>x</sub> có xu hướng tương tự tại vị trí 15% tay, tuy nhiên tại các vị trí tay ga 30% và 100%, khi tốc độ động cơ lớn hơn 2000 vg/ph, lúc này động cơ ưu tiên phát ra công suất lớn nhất, lamđã của động cơ có xu hướng đậm (bảng 2), vì vậy hiệu suất chuyển hóa CO và HC có giảm nhanh.

#### 4. KẾT LUẬN

Bài báo đã thiết kế và tính toán được hiệu quả bộ xúc tác ba thành phần trên động cơ ô tô Toyota Vios 1.5. Ảnh hưởng của các thông số nhiệt độ, lamđã, mật độ lỗ, lượng kim loại quý đến hiệu quả bộ xúc tác cũng được nghiên cứu. Bộ xúc tác ba thành phần cho động cơ ô tô Toyota Vios 1.5 có các thông số như thể tích, lượng kim loại quý, mật độ lỗ bộ xúc tác lần lượt là 2 lít, 2,68 gam và 400 lỗ/inch<sup>2</sup>. Kết quả nghiên cứu cũng chỉ ra rằng, hiệu suất chuyển hóa CO, HC và NO<sub>x</sub> cao nhất lần lượt là 99,9%, 70,2% và 95,6%. Khi tăng tốc độ động cơ và tay ga, hiệu suất xử lý CO, HC và NO<sub>x</sub> có xu hướng giảm, khi lamđã động cơ nhỏ hơn một, hiệu suất chuyển hóa CO và HC giảm mạnh.

#### LỜI CẢM ƠN

Tác giả xin chân thành cảm ơn, Giáo dục và Đào tạo, đề tài cấp Bộ mã số B2016-BKA-18 đã hỗ trợ kinh phí để thực hiện nghiên cứu này.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Jan Kaspar, Paolo Fornasero, 2003. Neal Hickey, Automotive catalytic converters: current status and some perspectives, *Catal today* 77, 419-449.
- [2]. H. He, H.X.Dai, L.H.Ng, K.W.Wong, C. T. Au, 2002. Pd, Pt and Rh-Loaded Ce<sub>0.6</sub>Zr<sub>0.35</sub>Y<sub>0.05</sub>O<sub>2</sub> Three-Way Catalysts, *Journal of catalysis* 206, 1-13 .
- [3]. Xiaodong Wu, Luhua Xu, Duan Weng, 2004. The thermal stability and catalytic performance of Ce-Zr promoted Rh-Pd/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> automotive catalysts, *Applied Surface Science* 221, 375–383.
- [4]. Takeru Yoshida, Akemi sato, Hiromasa Suzuki, 2006. Development of High Performance Three-Way-Catalyst, *SAE 2006-01-1061*.
- [5]. Toshitaka Tanabe, Miho Hatanaka and Yasutaka Nagai, 2009. Development of Double-Layered Three-Way Catalysts, *SAE 2009-01-1081*.

[6]. Masanori Nakamura, Hironori Wakamatsu, Katsuo Suga, Toru Sekiba, Yoshiaki Hiramoto, Katsuhiko Shibata, 2009. Ultrafine Precious Metal Catalyst for High Conversion Efficiency with Low Precious Metal Loading, *SAE 2009-01-1069*.

[7]. Christopher Depcik, Sudarshan Loya, Anand Srinivasan, Travis Wentworth and Susan Stagg-Williams, 2013. Adaptive Global Carbon Monoxide Kinetic Mechanism over Platinum/Alumina Catalysts, *Catalysts*, 3, 517-542.

[8]. Karthik Ramanathan and Chander Shekhar Sharma, 2011. Kinetic Parameters Estimation for Three Way Catalyst Modeling *Ind. Eng. Chem. Res.*, 50 (17), pp 9960–9979.

[7]. Hoàng Đình Long, Nguyễn Kim Kỳ, 2015. Nghiên cứu hiệu quả bộ xúc tác khí thải xe máy trong giai đoạn khởi động lạnh và chạy âm máy. *Tạp chí Khoa học và Công nghệ Trường Đại học Công nghiệp Hà Nội*, số 27.

[8]. Hoàng Đình Long, 2011. Tính toán thiết kế tối ưu bộ xúc tác trung hòa khí thải ba chức năng cho xe ô tô du lịch. *Tạp chí Giao thông Vận tải*, Số 6, trang 31-34, Hà Nội 2011.

[9]. Nguyễn Thế Lương, 2018. Nghiên cứu mô phỏng đánh giá hiệu quả bộ xúc tác ba thành phần trên động cơ phun xăng điện tử khi sử dụng nhiên liệu xăng pha cồn E10-E20, *Tạp chí Khoa học và Công nghệ các trường đại học kỹ thuật*, số 2.

[10]. Nguyễn Duy Tiến, Nguyễn Thế Lương, La Vạn Thắng, Đinh Xuân Thành, 2017. Nghiên cứu, đánh giá ảnh hưởng của kết cấu hình học bộ xúc tác ba thành phần đến các tính năng kinh tế, kỹ thuật và phát thải của xe máy phun xăng điện tử, *Tạp chí Khoa học và Công nghệ Trường Đại học Công nghiệp Hà Nội*, số 41, 8.

[11]. Nguyễn Duy Tiến, Nguyễn Hữu Đức, La Vạn Thắng, Trần Quang Vinh, Nguyễn Thế Lương, 2017. Nghiên cứu, đánh giá ảnh hưởng của mật độ lỗ bộ xúc tác ba thành phần đến công suất, tiêu thụ nhiên liệu và phát thải của xe máy, *Tạp chí cơ khí Việt Nam*, số 7.