

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Bedeutung der Katalyse . . . . .	2
1.2	Die Katalyse in der Abgasnachbehandlung . . . . .	3
1.3	Numerische Modellierung von Abgaskatalysatoren . . . . .	4
1.4	Ziel der Arbeit . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Grundlagen der katalytischen Autoabgasnachbehandlung</b>	<b>9</b>
2.1	Grundlagen der motorischen Verbrennung . . . . .	9
2.2	Schadstoffkomponenten des motorischen Abgases . . . . .	11
2.3	Gesetzliche Festlegung der Schadstoffemissionen . . . . .	15
2.4	Die katalytische Abgasnachbehandlung . . . . .	16
2.5	Der Aufbau von Abgaskatalysatoren . . . . .	17
2.6	Katalysatortypen . . . . .	20
2.6.1	Drei-Wege-Katalysator . . . . .	20
2.6.2	Dieseloxydationskatalysator ( <i>DOC</i> ) . . . . .	21
2.6.3	$\text{NO}_x$ -Speicher-/Reduktionskatalysator . . . . .	21
2.6.4	<i>SCR</i> -Katalysatoren . . . . .	23
2.6.5	Dieselpartikelfilter ( <i>DPF</i> ) . . . . .	23
<b>3</b>	<b>Modellierung reaktiver Strömungen in katalytischen Kanälen</b>	<b>25</b>
3.1	Kanalströmungsmodelle . . . . .	25
3.1.1	Allgemeines <i>Navier-Stokes</i> -Modell . . . . .	25
3.1.2	Stationäres zylindersymmetrisches <i>Navier-Stokes</i> -Modell . . . . .	29
3.1.3	Zylindersymmetrische Grenzschnittnäherung ( <i>Boundary-Layer</i> -Modell) . . . . .	31
3.1.4	Ideales Strömungsrohr ( <i>Plug-Flow</i> -Modell) . . . . .	32
3.1.5	Ideales Strömungsrohr mit Stofftransportkoeffizienten . . . . .	34
3.2	Modellierung der Transportlimitierung im Washcoat . . . . .	36
3.2.1	Unendlich schneller Stofftransport im Washcoat . . . . .	36
3.2.2	Mehrdimensionales Reaktions-Diffusions-Modell . . . . .	38
3.2.3	Eindimensionales Reaktions-Diffusions-Modell . . . . .	40

## Inhaltsverzeichnis

3.2.4	Effektivitätskoeffizienten-Modell . . . . .	41
3.3	Berechnung der Diffusionskoeffizienten . . . . .	43
3.3.1	Gasphase . . . . .	43
3.3.2	Washcoat . . . . .	43
<b>4</b>	<b>Modellierung chemischer Reaktionen</b>	<b>47</b>
4.1	Spezies . . . . .	47
4.2	Chemische Reaktionen . . . . .	49
4.2.1	Allgemeines . . . . .	49
4.2.2	Reaktionen in der Gasphase . . . . .	51
4.2.3	Reaktionen auf der Oberfläche . . . . .	52
4.2.4	Reaktionsmechanismen auf Oberflächen . . . . .	53
<b>5</b>	<b>Einfluß der Modellparameter</b>	<b>57</b>
5.1	Verwendetes Kanalmodell . . . . .	57
5.2	Geschwindigkeitsprofile . . . . .	62
5.3	Light-Off-Verhalten. Einfluß des geometrischen Faktors $F_{cat/geo}$ . . . . .	63
5.4	Einfluß der Temperatur . . . . .	65
5.5	Einfluß der Porenradienverteilung . . . . .	68
5.6	Einfluß der Washcoat-Dicke . . . . .	70
5.7	Verbesserung des Stofftransports zur Kanalwand . . . . .	71
<b>6</b>	<b>Modellierung von thermisch gealterten Drei-Wege-Katalysatoren</b>	<b>75</b>
6.1	Stand der Forschung . . . . .	75
6.2	Experimenteller Aufbau . . . . .	78
6.3	Verwendetes Simulationsprogramm . . . . .	82
6.4	Modellierung . . . . .	84
6.4.1	Numerisches Modell . . . . .	84
6.4.2	Materialparameter . . . . .	85
6.4.3	Chemisches Modell . . . . .	86
6.5	Voruntersuchung ohne chemische Reaktionen . . . . .	90
6.6	Untersuchung mit chemischen Reaktionen. Bestimmung der Alterungs- zustände . . . . .	92
<b>7</b>	<b>Vergleich der verschiedenen Transportmodelle zur Simulation katalyti- scher Kanäle</b>	<b>97</b>
7.1	Stand der Forschung . . . . .	97
7.2	Experimentelle Untersuchung . . . . .	100
7.3	Modellierung . . . . .	101
7.3.1	Allgemeine Bemerkungen . . . . .	101
7.3.2	Verwendete Modellparameter . . . . .	102

## Inhaltsverzeichnis

7.4	Numerische Modelle und verwendete Simulationsprogramme . . . . .	105
7.5	Chemisches Modell . . . . .	107
7.6	Vergleich der katalytischen Kanalmodelle . . . . .	109
7.6.1	Simulationen mit unendlich schnellem Stofftransport innerhalb des Washcoats . . . . .	109
7.6.2	Simulationen mit dem Effektivitätskoeffizienten-Modell . . . . .	111
7.6.3	Simulationen mit den Reaktions-Diffusions-Modellen . . . . .	112
7.6.4	Vergleich zwischen Simulationen mit verschiedenen Washcoat- Modellen und Experiment. . . . .	113
7.6.5	Dreidimensionale Transporteffekte . . . . .	115
7.6.6	Vergleich der Rechenzeiten . . . . .	116
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>121</b>
<b>A</b>	<b>Reaktionsmechanismen</b>	<b>127</b>
A.1	Methanoxidation auf Platin . . . . .	128
A.2	$C_3H_6$ -, CO- und NO-Oxidation und NO-Reduktion auf Platin . . . . .	129
<b>B</b>	<b>Diagramme und Konturplots</b>	<b>133</b>
	<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>151</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>155</b>