

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
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
2 Grundlagen der katalytischen Autoabgasnachbehandlung	9
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 Dieseloxidationskatalysator (<i>DOC</i>)	21
2.6.3 NO _x -Speicher-/Reduktionskatalysator	21
2.6.4 SCR-Katalysatoren	23
2.6.5 Dieselpartikelfilter (<i>DPF</i>)	23
3 Modellierung reaktiver Strömungen in katalytischen Kanälen	25
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 Grenzschichtnäherung (<i>Boundary-Layer-Modell</i>)	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
4	Modellierung chemischer Reaktionen	47
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
5	Einfluß der Modellparameter	57
5.1	Verwendetes Kanalmodell	57
5.2	Geschwindigkeitsprofile	62
5.3	Light-Off-Verhalten. Einfluß des geometrischen Faktors $F_{\text{cat/geo}}$	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
6	Modellierung von thermisch gealterten Drei-Wege-Katalysatoren	75
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 Alterungszustände	92
7	Vergleich der verschiedenen Transportmodelle zur Simulation katalytischer Kanäle	97
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
8	Zusammenfassung	121
A	Reaktionsmechanismen	127
A.1	Methanoxidation auf Platin	128
A.2	$C_3H_6\text{-}$, CO- und NO-Oxidation und NO-Reduktion auf Platin	129
B	Diagramme und Konturplots	133
Symbolverzeichnis		151
Literaturverzeichnis		155