

NGHIÊN CỨU TẠO KHÍ GIÀU H_2 CUNG CẤP CHO ĐỘNG CƠ DIESEL BẰNG PHƯƠNG PHÁP BIẾN ĐỔI NHIỆT HÓA NHIÊN LIỆU DIESEL VỚI KHÍ THẢI

STUDY ON CREATION OF H_2 -RICH GAS FOR DIESEL ENGINE BY EXHAUST GAS DIESEL FUEL REFORMING

PGS, TS. Hoàng Đình Long¹, ThS. Trịnh Xuân Phong², TS. Nguyễn Tường Vi³

¹Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội

²Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật Nam Định

³Trường Đại học Công nghệ Đồng Nai

TÓM TẮT

Bổ sung khí giàu hydro vào động cơ diesel để giảm phát thải độc hại của động cơ là một phương pháp kiểm soát khí thải hiệu quả đã được thừa nhận. Tuy nhiên, việc tích trữ, bảo quản và vận chuyển khí giàu hydro để cung cấp liên tục cho động cơ gặp nhiều khó khăn do hydro có tỷ trọng và nhiệt trị mole thấp. Để giải quyết các khó khăn này, bài báo đã nghiên cứu phương pháp tạo ra khí giàu hydro trên động cơ nhờ phản ứng xúc tác biến đổi nhiệt hoá nhiên liệu diesel với khí thải tận dụng năng lượng và các thành phần hơi nước, ô xi và các bon nic của khí thải. Kết quả mô hình hoá cho thấy ngay ở tải trọng nhỏ và trung bình của động cơ với mức luân hồi khí thải 10-30%, bộ xúc tác đã có thể tạo ra và cung cấp liên tục khí giàu hydro với hàm lượng hydro từ 9-18% cho động cơ.

Từ khóa: *Biến đổi nhiệt hoá nhiên liệu trên động cơ, tạo khí giàu hydro.*

ABSTRACT

Adding hydrogen-rich gas into diesel engines for engine toxic exhaust emission reduction is a very interesting and accredited approach for effective emission control. However, the storage, conservation and distribution of hydrogen-rich gas to continuously supply to the engine meet many difficulties because hydrogen is a very light gas and has low mole caloric value. To overcome these problems, the paper studies the method of on-board H_2 -rich gas production by diesel fuel reforming with the components of steam, oxygen and carbondioxide of exhaust gas. Results of modeling study indicate that even at low and average load with 10%-30% exhaust gas recirculation through the reformer, the hydrogen content in the reformate gas reach to 9%-18%.

Keywords: *On-board thermochemical fuel reforming, hydrogen-rich gas production.*

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Sự ô nhiễm môi trường do phát thải khói bụi của động cơ diesel đang ngày càng trở nên trầm trọng, đặc biệt là ở các đô thị lớn. Do vậy, việc nghiên cứu giảm phát thải của động cơ là rất cần thiết. Có nhiều phương pháp đã và đang được nghiên cứu áp dụng để giảm phát thải, trong đó, các phương pháp cải thiện nhiên liệu và quá trình cháy được quan tâm nhiều như phương pháp sử dụng nhiên liệu khí giàu hydro hay bổ sung một tỷ lệ khí giàu hydro vào động cơ cùng nhiên liệu diesel.

Các công trình nghiên cứu sử dụng nhiên liệu hydro cho động cơ đốt trong để thay thế hoàn toàn nhiên liệu xăng hoặc diesel đã được nhiều nhà nghiên cứu thực hiện [1,2,3]. Kết quả nghiên cứu cho thấy nhiên liệu này có đặc điểm cháy nhanh, trị số ôc tan cao nên dùng được trên động cơ có tỷ số nén cao và cho phép động cơ có thể làm việc ở tốc độ rất cao, nhờ đó cải thiện được hiệu suất động cơ [2]. Thêm nữa, khí thải của động cơ hydro rất sạch, giới hạn thành phần hỗn hợp đảm bảo khả năng cháy tốt rất rộng nên động cơ có thể làm việc với hỗn hợp loãng, góp phần làm tăng tính kinh tế và giảm phát thải của động cơ [4]. Tuy nhiên, nhiên liệu hydro có nhược điểm so với nhiên liệu xăng và diesel là nhiệt trị mole rất thấp nên nếu không thay đổi kết cấu động cơ khi chuyển từ động cơ chạy xăng hoặc diesel sang động cơ chạy hoàn toàn bằng hydro thì công suất động cơ sẽ bị giảm nhiều [2]. Thêm nữa, việc sản xuất, vận chuyển và tích trữ bảo quản nhiên liệu hydro khá khó khăn và tốn kém do nhiên liệu có tỷ trọng rất thấp [6].

Chính vì vậy, việc nghiên cứu bổ sung hydro hoặc khí giàu hydro (hỗn hợp khí chứa hydro) vào nhiên liệu truyền thống được quan tâm nhiều hơn. Với phương pháp này, hydro hoặc khí giàu hydro chỉ được cấp một tỷ lệ nhất định vào động cơ để cải thiện quá trình

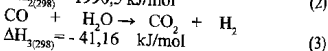
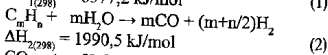
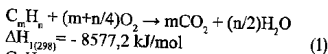
cháy [5, 6, 7]. Kết quả nghiên cứu cho thấy, quá trình cháy khi đó triệt để hơn, hiệu suất nhiệt động cơ tăng và do đó suất tiêu hao nhiên liệu và phát thải độc hại giảm trong khi không cần thay đổi kết cấu động cơ so với khi dùng xăng hoặc diesel. Vấn đề đặt ra là cần có nguồn cung khí giàu H₂ ổn định ngay trên động cơ để động cơ có thể hoạt động liên tục với hỗn hợp nhiên liệu nói trên.

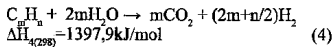
Bài báo này, trình bày nghiên cứu phương pháp tạo ra và cung cấp khí giàu H₂ cho động cơ diesel nhờ phản ứng xúc tác biến đổi nhiệt hoá một phần nhiên liệu với các thành phần khí thải, tận dụng chính năng lượng khí thải cho các phản ứng thu nhiệt. Việc nghiên cứu được thực hiện bằng mô hình hoá trên động cơ xe Ford Transit, dung tích xi lanh 2,4 lít, công suất 138 ml, tốc độ 4000 v/p.

2. MÔ HÌNH HOÁ QUÁ TRÌNH BIẾN ĐỔI NHIỆT HÓA NHIÊN LIỆU DIESEL VỚI KHÍ THẢI

2.1. Các phản ứng xúc tác

Nhiên liệu diesel là tổng hợp của nhiều loại các bua hydro C_mH_n với số nguyên tử các bon và hydro trung bình trong phân tử là m=14,4 và n=24,9, tức công thức phân tử chung của nhiên liệu diesel tiêu chuẩn có thể được coi gần đúng là C_{14,4}H_{24,9} [8]. Theo Hoang và Chan [9], trong môi trường xúc tác thích hợp có nhiệt độ đủ lớn (≥ 400°C) và có hơi nước và ô xy thì nhiên liệu các bua hydro C_mH_n (nhiên liệu diesel C_{14,4}H_{24,9}) sẽ có các phản ứng cháy và phản ứng nhiệt hoá với nước như sau:





$\Delta H_{4(298)}$ là nhiệt sinh của phản ứng, dấu (-) chỉ rằng phản ứng tỏa nhiệt, ngược lại dấu (+) là phản ứng thu nhiệt, tức là cần phải cấp đủ nhiệt để duy trì nhiệt độ cần thiết thì phản ứng đó mới xảy ra. Tốc độ động học của các phản ứng trên được xác định như sau:

$$R_1 = \frac{k_1 \cdot P_{C_m H_n} \cdot P_{O_2}^{1/2}}{\left(1 + K^e_{C_m H_n} \cdot P_{C_m H_n} + K^e_{O_2} \cdot P_{O_2}^{1/2}\right)^2} \quad (5)$$

$$R_2 = \frac{k_2}{P_{H_2}^{2,5}} \left(P_{C_m H_n} \cdot P_{H_2O}^{16} - \frac{P_{H_2}^{33} \cdot P_{CO}^{16}}{K_e^2} \right) \cdot \frac{1}{Q_r} \quad (6)$$

$$R_3 = \frac{k_3}{P_{H_2}} \left(P_{CO} \cdot P_{H_2O} - \frac{P_{H_2} \cdot P_{CO_2}}{K_e^3} \right) \cdot \frac{1}{Q_r} \quad (7)$$

$$R_4 = \frac{k_4}{P_{H_2}^{3,5}} \left(P_{C_m H_n} \cdot P_{H_2O}^{32} - \frac{P_{H_2}^{49} \cdot P_{CO_2}^{16}}{K_e^4} \right) \cdot \frac{1}{Q_r} \quad (8)$$

$$Q_r = 1 + \frac{K_{CO} \cdot P_{CO} + K_{H_2} \cdot P_{H_2} + K_{C_m H_n} \cdot P_{C_m H_n} + \frac{K_{H_2O} \cdot P_{H_2O}}{P_{H_2}}}{P_{H_2}} \quad (9)$$

Nếu nhiệt độ > 800°C thì còn có phản ứng nhiệt hoá của nhiên liệu với CO₂ [10].

Ở đây, R_j - (kmol/kg cat h) là tốc độ động học của phản ứng j (j=1-4); P_{C_mH_n}, P_{O₂},... là áp suất riêng của các thành phần C_mH_n, O₂, v.v...,

$k_j = k_{j0} \cdot e^{\frac{-E_j}{RT}}$ là hằng số động học của phản ứng j

(j=1-4), k_{0j} và E_j (kJ/mol) lần lượt là hằng số và năng lượng phản ứng, R (kJ/mol.K) là hằng số khí; T(K) là nhiệt độ khí; K_e là hằng số cân bằng của phản ứng thứ j (j=2-4), $K_i^C = K_{oi}^C \cdot e^{(-\Delta H_i^C)/RT}$ là hằng số hấp thụ của thành phần thứ i (i=C_mH_n, O₂). Các số liệu liên quan đến các hằng số trên có thể được tìm thấy trong tài liệu tham khảo [10].

Tốc độ sinh ra hoặc mất đi của một thành

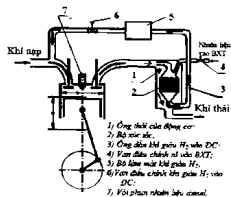
phần khí nào đó trong quá trình phản ứng biểu diễn bởi các phản ứng (1) đến (4) được xác định bằng cách cộng đại số tốc độ phản ứng của thành phần đó trong toàn bộ các phản ứng. Theo nguyên tắc này, tốc độ thay đổi của các khí thành phần trong quá trình phản ứng trong BXT được tích tụ từ tất cả các phản ứng.

2.2. Phản ứng biến đổi nhiệt hóa diesel với các thành phần khí thải động cơ

Khí thải của động cơ diesel chứa một hàm lượng lớn hơi nước (10%-16%) là sản phẩm của phản ứng cháy nhiên liệu và không khí và chứa một hàm lượng đáng kể o xy thừa (5%-10%) do quá trình cháy không hết vì λ > 1,4 nên có thể không cần phải cấp hơi nước hoặc o xy bên ngoài vào bộ xúc tác (BXT). Thêm nữa, nhiệt độ khí thải tại khu vực ống thải gần cửa thải có nhiệt độ khá cao (trên 400°C) nên đủ để sấy nóng BXT và cấp nhiệt cho phản ứng hơi nước với nhiên liệu mà không cần phải dùng nguồn nhiệt bên ngoài.

Nhiệt độ khí thải thường < 800°C nên phản ứng nhiệt hoá của nhiên liệu với CO₂ chậm, có thể bỏ qua [11]. Như vậy, nếu cho nhiên liệu diesel và khí thải vào BXT được sấy nóng bằng khí thải tới nhiệt độ > 400°C thì sẽ xảy ra các phản ứng nhiệt hoá (1) đến (4) như trên. Thành phần khí thải của động cơ trước BXT được đo bằng các thiết bị phân tích khí trong phòng thí nghiệm.

2.3. Sơ đồ bố trí chung BXT trên hệ thống thải

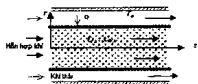


Hình 1. Sơ đồ nguyên lý BXT biến đổi nhiệt hóa nhiên liệu với khí thải

Sơ đồ bố trí BXT trên động cơ được chỉ ra trên hình 1. BXT được đặt trong ống thải tại gần cổ góp và có dòng khí thải bao quanh để được sấy nóng tốt. Trong BXT có chứa các hạt xúc tác. Để đảm bảo được 30% khí thải đi qua ở chế độ toàn tải với tổn thất áp suất không quá 10%, BXT được chọn có đường kính 60mm, dài 100mm.

2.4. Tính toán sự tạo khí giàu H₂

Hình 2, giới thiệu sơ đồ 2-D của BXT phục vụ nghiên cứu theo phương pháp mô hình hóa. BXT có dạng hình trụ, đường kính trong 60mm dài 100mm được điền đầy chất xúc tác sulfat nickel dạng hạt có đường kính 1,75mm. BXT được đặt trong ống thải của động cơ để duy trì nhiệt độ từ 400-700°C. Khí nạp vào BXT là hỗn hợp của diesel, oxy và hơi nước với các tỷ lệ thành phần khác nhau tương ứng với các chế độ làm việc của động cơ và các chế độ luân hồi khí thải cần thiết qua lõi BXT.



Hình 2. Sơ đồ 2-D của bộ xúc tác

Có thể giả thiết tính chất nhiệt động và dòng chảy của hỗn hợp nạp đồng nhất tại các điểm trên tiết diện ngang tại cửa vào của BXT. Vì nhiệt độ khí thải thấp hơn 1000°C nên có thể bỏ qua sự truyền nhiệt do bức xạ. Các hiện tượng xảy ra trong BXT bao gồm, các phản ứng hóa học trên bề mặt chất xúc tác, sự trao đổi nhiệt và trao đổi chất theo hướng dọc và theo hướng bán kính BXT. Bên ngoài BXT có dòng khí thải bao quanh và truyền nhiệt cho BXT. Nên mô hình toán sẽ gồm các phương trình vi phân mô tả sự trao đổi nhiệt giữa khí thải bên ngoài BXT với BXT và các phương trình biểu diễn quá trình trao đổi nhiệt và phản ứng hoá học bên trong BXT.

Các phương trình được viết dựa trên nguyên lý cân bằng năng lượng và cân bằng khối lượng của khí và BXT như sau:

- Các phương trình trao đổi nhiệt sấy nóng BXT:

$$\frac{\partial T_{g1}}{\partial t} + u_1 \frac{\partial T_{g1}}{\partial x} = - \frac{q_{gxt}}{\rho_g c_{pg} V_1} \quad (10)$$

$$\frac{\partial T_p}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T_p}{\partial x^2} + \frac{q_{gp} - q_{cvt} - q_{rad}}{\rho_p c_p V_2} \quad (11)$$

- Các phương trình biểu diễn quá trình trao đổi nhiệt và trao đổi chất (thay đổi thành phần khí) xảy ra bên trong BXT:

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \left(\frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_i}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} \right) \\ - u \frac{\partial C_i}{\partial z} + h_{Di} S_{cat} (C_{si} - C_i) \end{aligned} \quad (12)$$

$$\varepsilon \rho_g c_{pg} \frac{\partial T_g}{\partial t} = -u \rho_g c_{pg} \frac{\partial T_g}{\partial z} + S_h h (T - T_g) \quad (13)$$

$$\rho_{cat} r_i \frac{M}{\rho_g} = h_{Di} S_{cat} (C_{si} - C_i) \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \rho_b c_{pb} \frac{\partial T}{\partial t} = K \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \\ S_h h (T_g - T) + \rho_{cat} \sum_{j=1}^4 (-\Delta H_j) \eta_j R_j \end{aligned} \quad (15)$$

Trong đó T_{g1}, T_g là nhiệt độ khí thải bên ngoài và bên trong BXT; T_p là nhiệt độ thân BXT; u₁ và u là tốc độ dòng khí ngoài và trong BXT; R_j tốc độ phản ứng j (j=1-4) biểu diễn bởi các phương trình (1) đến (4); i ký hiệu cho một thành phần khí; j ký hiệu cho số hạng của chuỗi; ρ_g, ρ_{cat}, ρ_b (kg/m³) lần lượt là mật độ khí, chất xúc tác và lõi BXT; C_g, C_{pg} (J/kgK) lần lượt là nhiệt dung riêng của khí và của BXT; h_{Di} (m/s) là hệ số trao đổi chất của thành phần khí i; h(W/m²K) là hệ số truyền nhiệt; T và T_g (K) lần lượt là nhiệt độ của pha khí và của chất xúc tác; C_{si} và C_i lần lượt là thành phần mol của các khí thành phần trên bề mặt chất xúc tác và của khí; r và z (m) là tọa độ trục của BXT; S_h (m²/m³) là diện tích bề mặt chất xúc tác trên một đơn vị thể tích chất xúc

tác trong lò; ΔH_i (J/mol) là nhiệt trao đổi của phản ứng i ; K (W/mK) là hệ số dẫn nhiệt trong BXT; u (m/s) là tốc độ bề mặt của khí. Điều kiện đầu và biên như sau:

a. Điều kiện đầu $t = 0$ (bất đầu cấp khí vào BXT): $T = T_0; C_g = C_{g0};$ (16)

b. Điều kiện biên:
- Tại $z = 0: T_g = T_{gin}; C_g = C_{gin}$ (17)

- Tại $z = L: \frac{\partial C_g}{\partial z} = 0; \frac{\partial T_g}{\partial z} = 0;$ (18)

- Tại tâm $r = 0: \frac{\partial C_g}{\partial r} = 0; \frac{\partial T_g}{\partial r} = 0;$ (19)

- Tại bề mặt trong của thành lò $r = R:$

$\frac{\partial C_g}{\partial r} = 0; (K + k_g) \frac{\partial T}{\partial r} = \alpha (T_{gi} - T)$ (20)

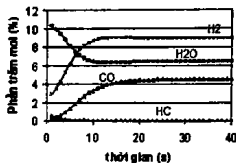
Ở đây α là hệ số truyền nhiệt tổng hợp qua thành BXT; K và k_g (W/mK) là hệ số dẫn nhiệt của thành và của khí trong BXT được xác định và tính toán theo Yunus [11].

3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU

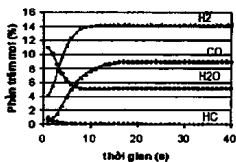
Để đánh giá được tổng thể sự hoạt động của BXT, cần tính toán hàm lượng hydro tạo thành ở các chế độ tải của động cơ là 20%, 50% và 100%; lưu lượng khí thải luân hồi qua BXT được điều chỉnh ở 30% và lượng nhiên liệu cấp vào BXT ứng với các chế độ tải nói trên lần lượt là 0,5 l/h, 1,0 l/h, và 1,5 l/h, tương đương khoảng 10% lượng nhiên liệu tiêu thụ của động cơ.

Để tính toán được các thông số vừa nêu, cần phải giải hệ các phương trình không tuyến tính (10) đến (15) kết hợp với các tốc độ phản ứng được xác định theo các hệ thức (5) đến (8) và các điều kiện đầu và điều kiện biên nói trên. Phương pháp Newton Raphsan và sai phân hữu

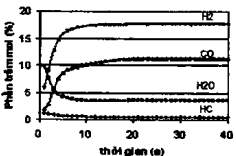
hạn được sử dụng để giải hệ các phương trình trên. Kết quả tính toán được trình bày trên các đồ thị hình 3 đến hình 5.



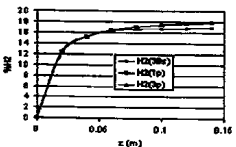
Hình 3. Hàm lượng H_2 tại 20% tải, khí thải qua BXT 30%, diesel cấp vào BXT 0,5 l/h



Hình 4. Hàm lượng H_2 tại 50% tải, khí thải qua BXT 30%, diesel cấp vào BXT 1 l/h



Hình 5. Hàm lượng H_2 tại 100% tải, khí thải qua BXT 30%, diesel cấp vào BXT 1,5 l/h

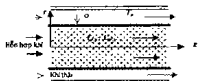


Hình 6. Hàm lượng H_2 ứng với các chiều dài BXT khác nhau tại 100% tải, khí thải qua BXT 30%, diesel cấp vào BXT 1,5 l/h

Sơ đồ bố trí BXT trên động cơ được chỉ ra trên hình 1. BXT được đặt trong ống thải tại gần cổ góp và có dòng khí thải bao quanh để được sấy nóng tốt. Trong BXT có chứa các hạt xúc tác. Để đảm bảo được 30% khí thải đi qua ở chế độ toàn tải với tổn thất áp suất không quá 10%, BXT được chọn có đường kính 60mm, dài 100mm.

2.4. Tính toán sự tạo khí giàu H₂

Hình 2, giới thiệu sơ đồ 2-D của BXT phục vụ nghiên cứu theo phương pháp mô hình hóa. BXT có dạng hình trụ, đường kính trong 60mm dài 100mm được điền đầy chất xúc tác sulfat nickel dạng hạt có đường kính 1,75mm. BXT được đặt trong ống thải của động cơ để duy trì nhiệt độ từ 400-700°C. Khí nạp vào BXT là hỗn hợp của diesel, oxy và hơi nước với các tỷ lệ thành phần khác nhau tương ứng với các chế độ làm việc của động cơ và các chế độ luân hồi khí thải cần thiết qua lõi BXT.



Hình 2. Sơ đồ 2-D của bộ xúc tác

Có thể giả thiết tính chất nhiệt động và dòng chảy của hỗn hợp nạp đồng nhất tại các điểm trên tiết diện ngang tại cửa vào của BXT. Vì nhiệt độ khí thải thấp hơn 1000°C nên có thể bỏ qua sự truyền nhiệt do bức xạ. Các hiện tượng xảy ra trong BXT bao gồm, các phản ứng hóa học trên bề mặt chất xúc tác, sự trao đổi nhiệt và trao đổi chất theo hướng dọc và theo hướng bán kính BXT. Bên ngoài BXT có dòng khí thải bao quanh và truyền nhiệt cho BXT. Nên mô hình toán sẽ gồm các phương trình vi phân mô tả sự trao đổi nhiệt giữa khí thải bên ngoài BXT với BXT và các phương trình biểu diễn quá trình trao đổi nhiệt và phản ứng hoá học bên trong BXT.

Các phương trình được viết dựa trên nguyên lý cân bằng năng lượng và cân bằng khối lượng của khí và BXT như sau:

- Các phương trình trao đổi nhiệt xảy nóng BXT:

$$\frac{\partial T_{g1}}{\partial t} + u_1 \frac{\partial T_{g1}}{\partial x} = - \frac{q_{gp1}}{\rho_g c_{pg} V_1} \quad (10)$$

$$\frac{\partial T_p}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T_p}{\partial x^2} + \frac{q_{gp} - q_{cva} - q_{rad}}{\rho_p c_p V_2} \quad (11)$$

- Các phương trình biểu diễn quá trình trao đổi nhiệt và trao đổi chất (thay đổi thành phần khí) xảy ra bên trong BXT:

$$\varepsilon \frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \left(\frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_i}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} \right) - u \frac{\partial C_i}{\partial z} + h_{Di} S_{cat} (C_{ai} - C_i) \quad (12)$$

$$\rho_{pg} c_{pg} \frac{\partial T_g}{\partial t} = -u \rho_g c_{pg} \frac{\partial T_g}{\partial z} + S_h h (T - T_g) \quad (13)$$

$$\rho_{cat} T_1 \frac{M}{\rho_g} - h_{Di} S_{cat} (C_{st} - C_i) \quad (14)$$

$$\rho_b c_{pb} \frac{\partial T}{\partial t} = K \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + S_h h (T_g - T) + \rho_{cat} \sum_{j=1}^4 (-\Delta H_j) \eta_j R_j \quad (15)$$

Trong đó T_{g1} , T_g là nhiệt độ khí thải bên ngoài và bên trong BXT; T_p là nhiệt độ thân BXT; u_1 và u là tốc độ dòng khí ngoài và trong BXT; R_j tốc độ phản ứng j ($j=1-4$) biểu diễn bởi các phương trình (1) đến (4); i ký hiệu cho một thành phần khí; j ký hiệu cho số hạng của chuỗi; $\rho_g, \rho_{cat}, \rho_b$ (kg/m^3) lần lượt là mật độ khí, chất xúc tác và lõi BXT; C_{pg}, C_{pb} (J/kgK) lần lượt là nhiệt dung riêng của khí và của BXT; h_{Di} (m/s) là hệ số trao đổi chất của thành phần khí i ; h (W/m^2K) là hệ số truyền nhiệt; T và T_g (K) lần lượt là nhiệt độ của pha khí và của chất xúc tác; C_{ai} và C_i lần lượt là thành phần mol của các khí thành phần trên bề mặt chất xúc tác và của khí; r và z (m) là tọa độ trục của BXT; S_h (m^2/m^3) là diện tích bề mặt chất xúc tác trên một đơn vị thể tích chất xúc

tác trong lò; ΔH_1 (J/mol) là nhiệt trao đổi của phản ứng j ; K (W/mK) là hệ số dẫn nhiệt trong BXT; u (m/s) là tốc độ bề mặt của khí. Điều kiện đầu và biên như sau:

a. Điều kiện đầu $t = 0$ (bắt đầu cấp khí vào BXT): $T = T_0; C_s = C_{s0};$ (16)

b. Điều kiện biên:
 - Tại $z = 0: T_g = T_{gin}; C_{gi} = C_{gi}^{in}$ (17)

- Tại $z = L: \frac{\partial C_{gi}}{\partial z} = 0; \frac{\partial T_g}{\partial z} = 0;$ (18)

- Tại tâm $r = 0: \frac{\partial C_g}{\partial r} = 0; \frac{\partial T_g}{\partial r} = 0;$ (19)

- Tại bề mặt trong của thành lò $r = R:$
 $\frac{\partial C_g}{\partial r} = 0; (K + k_g) \frac{\partial T}{\partial r} = \alpha (T_{gi} - T)$ (20)

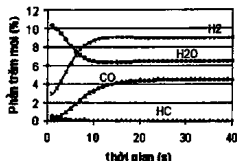
Ở đây α là hệ số truyền nhiệt tổng hợp qua thành BXT; K và k_g (W/mK) là hệ số dẫn nhiệt của thành và của khí trong BXT được xác định và tính toán theo Yunus [11].

3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU

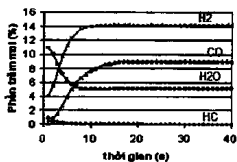
Để đánh giá được tổng thể sự hoạt động của BXT, cần tính toán hàm lượng hydro tạo thành ở các chế độ tải của động cơ là 20%, 50% và 100%; lưu lượng khí thải luân hồi qua BXT được điều chỉnh ở 30% và lượng nhiên liệu cấp vào BXT ứng với các chế độ tải nói trên lần lượt là 0,5 l/h, 1,0 l/h, và 1,5 l/h, tương đương khoảng 10% lượng nhiên liệu tiêu thụ của động cơ.

Để tính toán được các thông số vừa nêu, cần phải giải hệ các phương trình không tuyến tính (10) đến (15) kết hợp với các tốc độ phản ứng được xác định theo các hệ thức (5) đến (8) và các điều kiện đầu và điều kiện biên nói trên. Phương pháp Newton Raphsan và sai phân hữu

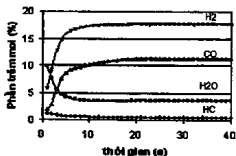
hạn được sử dụng để giải hệ các phương trình trên. Kết quả tính toán được trình bày trên các đồ thị hình 3 đến hình 5.



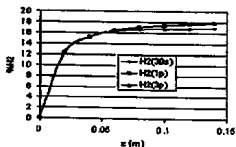
Hình 3. Hàm lượng H_2 tại 20% tải, khí thải qua BXT 30%, diesel cấp vào BXT 0,5 l/h



Hình 4. Hàm lượng H_2 tại 50% tải, khí thải qua BXT 30%, diesel cấp vào BXT 1 l/h



Hình 5. Hàm lượng H_2 tại 100% tải, khí thải qua BXT 30%, diesel cấp vào BXT 1,5 l/h



Hình 6. Hàm lượng H_2 ứng với các chiều dài BXT khác nhau tại 100% tải, khí thải qua BXT 30%, diesel cấp vào BXT 1,5 l/h

Có thể thấy rằng, với các điều kiện đầu và điều kiện biên được chọn gần với điều kiện làm việc ổn định thực tế của hệ thống thì cần 15 phút hoạt động là kết quả có thể đạt đến trạng thái ổn định phản ánh điều kiện hoạt động ổn định của động cơ và của hệ thống xúc tác tạo và cung cấp khí giàu hydro cho động cơ. Ở điều kiện tải nhỏ của động cơ, hàm lượng hydro trong khí sản phẩm cũng đạt đến 9% (hình 3). Tăng tải động cơ đồng nghĩa với tăng nhiệt khí thải và hơi nước trong khí thải, có điều kiện phản ứng nhiệt hoá được nhiều nhiên liệu hơn và tạo ra sản phẩm khí có hàm lượng hydro cao hơn. Hydro đạt đến 14% ở 50% tải (hình 4) và đạt đến 18% ở chế độ toàn tải (hình 5).

Kết quả tính toán cũng cho thấy hàm lượng hơi nước còn lại trong sản phẩm ở mức 4-6% nên có thể không cần phải tách trước khi cấp vào đường nạp của động cơ. Tuy nhiên, để giảm nhiệt độ khí nạp vào động cơ để tăng lượng khí nạp thì sản phẩm khí giàu hydro của quá trình biến đổi nhiệt hóa vẫn cần được làm mát trước khi được cấp vào đường nạp của động cơ.

Lưu lượng nhiên liệu cấp vào BXT từ 0,5 đến 1,5 l/h là vừa đủ để được biến đổi hết thành các khí giàu hydro. Với chiều dài BXT chọn 10 cm là hợp lý để BXT biến đổi hết lượng nhiên liệu cấp và hàm lượng hydro đạt đến trạng thái ổn định (hình 6).

4. KẾT LUẬN

Qua nghiên cứu tạo khí giàu H_2 trên động cơ nhờ biến đổi nhiệt hoá nhiên liệu diesel với khí thải, có thể rút ra một số kết luận sau:

- Ngay ở tải trọng nhỏ và trung bình của động cơ với mức luân hồi khí thải 10-30%, BXT đã có thể tạo ra khí giàu hydro với hàm lượng hydro từ 9-18% cho động cơ.

- Phương pháp để thực hiện nên có tiềm năng cao để triển khai nghiên cứu lắp đặt BXT này trên các xe ô tô dùng động cơ diesel chạy trong thành phố để giảm phát thải độc hại. ♦

Ngày nhận bài: 25/11/2016

Ngày phản biện: 29/12/2016

Tài liệu tham khảo:

- [1]. Jie Ma, Yongkang Su, Yucheng Zhou, Zhongli Zhang; International Journal of Hydrogen Energy 28 (2003) 77 – 83.
- [2]. Saravanan, G. Nagarajan, S. Narayanasam. Renewable Energy 33 (2008) 415–42.
- [3]. L.M. Das; International Journal of Hydrogen Energy 27 (2002) 953 – 965.
- [4]. M. Minutillo; International Journal of Hydrogen Energy, 2006.
- [5]. A. Tsolakis, A. Megaritis; International Journal of Hydrogen Energy 30 (2005) 731 – 745.
- [6]. N. Saravanan, G. Nagarajan, K.M. Kalaiselvan, C. Dhanasekaran. Renewable Energy 33 (2008) 422–427.
- [7]. M.A.S. Al-Baghdadi. Renewable Energy 28 (2003) 1471–1478.
- [8]. Ferguson, C. R. Internal combustion engines, John Willey & Son, 1986.
- [9]. D.L. Hoang, S.H. Chan; Applied Catalysis A: General 268 (2004) 207–216.
- [10]. W. Jin, X. Gu, S. Li, P. Huang, N. Xu, J. Shi. Chemical Engineering Science 55 (2000) p2617-2625.
- [11]. Yunus. Introduction to thermodynamics and heat transfer. McGraw-Hill, 1997.