

基于 GT-power 的三元催化器化学反应仿真研究

Study on the Vehicle Exhaust After-treatment based on Catalytic Reaction Simulation

叶建伟, 陈小东, 欧宗味, 郑建军, 卿辉斌

(重庆长安汽车股份有限公司, 重庆, 401120)

摘要: 利用 GT-power 进行尾气后处理催化反应仿真研究, 分析发动机排量、排气温度及过量空气系数等对转化效率及载体温度的影响。研究结果表明: 不同的发动机排量需要不同的载体体积相匹配, 增加发动机排量需适当增加载体体积; 排气温度越高, 有利于催化剂起燃及冷启动排放控制; 过量空气系数在 1 附近, 污染物才可全部实现高效转化。

关键词: GT-power; 三元催化器; 载体温度; 转化效率

Abstract: The influence of engine displacements, exhaust temperature and excess air ratio on the conversion efficiency and substrate temperature has been studied by catalytic reaction simulation using GT-power. The results show that different engine displacements have to match their specific substrate volume and enlarging the engine displacements can increase substrate volume properly; High exhaust temperature can facilitate catalyst light-off and emission control during cold start process; High conversion efficiency needs an appropriate excess air ratio of 1.

Key words: GT-power; TWC; substrate temperature; conversion efficiency

1. 概述

随着环境的日益恶化, 国家《2017 汽车产业中长期发展规划》中提出要加大汽车节能环保技术的研发及推广, 重点攻克高效的尾气后处理环保技术。三元催化器的催化剂起燃后, 缸内原排的 HC 化合物、CO 及 NO_x 在催化剂的作用下, 可高效转化为清洁的 CO₂、H₂O 和 N₂, 利用催化仿真模型, 提高三元催化器(催化器)的设计水平已势在必行^[1-4]。近年来, 随着催化反应机理研究的进步, 汽车尾气后处理催化仿真越来越多地应用于主机厂的载体设计^[5-7]。

本文利用 GT-power 软件的尾气后处理催化仿真模型, 以 A 款发动机的催化器载体为研究对象, 分析催化器入口气体参数(发动机排量、排气温度、过量空气系数等)对污染物转化效率及载体温度的影响。

2. 计算模型

催化仿真模型, 如图 1, 包括 6 个模块: 1 进口模块用于催化器入口气体流量、温度等参数输入、气体各组分质量分数等参数; 2 催化器进气端模块; 3 催化仿真模块用于输入催化反应方程、反应动力学参数、贵金属浓度、分区涂覆方式等, 催化反应机理包括 15 个氧化还原反应方程, 见表 1; 4 载体模块用于载体直径、长度、目数及壁厚、载体前端速度分布等参数输入; 5 催化器出气端模块; 6 出口模块用于催化器出口气体压力、温度等参数输入。

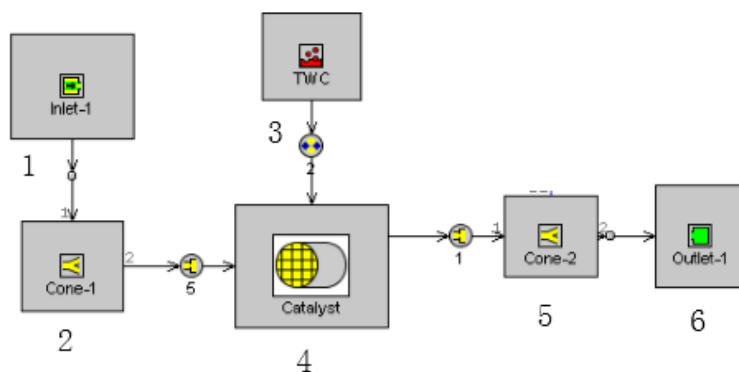


图 1 计算模型

表 1 化学反应机理

序号	反应物	生成物	指前因子	反应活化能
1	$\text{CO} + 0.5\text{O}_2$	CO_2	893.88	283.0
2	$\text{C}_3\text{H}_6 + 4.5\text{O}_2$	$3\text{CO}_2 + 3\text{H}_2\text{O}$	16355.0	16860.0
3	$\text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{O}_2$	$3\text{CO}_2 + 4\text{H}_2\text{O}$	$6.404\text{E}17$	165160.0
4	$\text{H}_2 + 0.5\text{O}_2$	H_2O	$1.814\text{E}15$	111450.0
5	$\text{CO} + \text{NO}$	$\text{CO}_2 + 0.5\text{N}_2$	13.79925	52374.0
6	$\text{C}_3\text{H}_6 + 9\text{NO}$	$3\text{CO}_2 + 3\text{H}_2\text{O} + 4.5\text{N}_2$	748350.0	90063.0
7	$\text{H}_2 + \text{NO}$	$\text{H}_2\text{O} + 0.5\text{N}_2$	7880.0	69237.0
8	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	$\text{CO}_2 + \text{H}_2$	0.0099696	56720.0
9	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{H}_2\text{O}$	$3\text{CO} + 6\text{H}_2$	0.01246208	22.0
10	$2\text{Ce}_2\text{O}_3 + \text{O}_2$	4CeO_2	2.943	5296.0
11	$\text{Ce}_2\text{O}_3 + \text{NO}$	$2\text{CeO}_2 + 0.5\text{N}_2$	79.2	25101.0
12	$\text{CO} + 2\text{CeO}_2$	$\text{Ce}_2\text{O}_3 + \text{CO}_2$	0.1824	31768.0
13	$\text{C}_3\text{H}_6 + 12\text{CeO}_2$	$6\text{Ce}_2\text{O}_3 + 3\text{CO} + 3\text{H}_2\text{O}$	13.57	39070.0
14	$\text{C}_3\text{H}_8 + 14\text{CeO}_2$	$7\text{Ce}_2\text{O}_3 + 3\text{CO} + 4\text{H}_2\text{O}$	17.7	39680.0
15	$\text{H}_2 + 2\text{CeO}_2$	$\text{Ce}_2\text{O}_3 + \text{H}_2\text{O}$	2.845	31768.0

3. 入口气体参数研究

根据催化器载体的单体性能试对催化仿真模型进行标定, 确定该催化剂配方所对应的催化反应动力学参数。重点分析催化器入口不同气体参数(发动机排量、排气温度、过量空气系数等)对 HC 化合物、CO、NO_x 转化效率及载体温度的影响, 催化器入口气体流量及各组分含量为稳态值、温度为瞬态值、N₂ 为平衡气体, 催化器载体参数和入口气体参数分别见表 2 和表 3。

表 2 催化器载体参数

项目	参数值
长度/mm	90
直径/mm	105.7
目数及壁厚	600/4
贵金属浓度/(g/cft)	30
CeO ₂ 浓度/(g/cft)	3000

表 3 催化器入口气体参数

项目		参数值
流量/(kg/s)		0.02
温度/K		300-740
CO ₂	质量分数	0.2475
H ₂ O		0.1131
O ₂		0.013
NO		0.0007
C ₃ H ₆		0.0007
C ₃ H ₈		0.0003
CO		0.0038
H ₂		0.0002

3.1 发动机排量对转化效率及载体温度影响

分析发动机排量分别为 0.02kg/s 和 0.04kg/s 对 HC 化合物及 CO 转化效率及载体温度的影响。计算结果如图 2 和图 3 所示,表明:当载体几何体积一定时,增加发动机排量会导致 HC 化合物及 CO 的转化效率降低,但可为载体升温提供更多的热量,有利于冷启动过程催化剂起燃。当发动机排量加倍、载体体积相应加倍时,计算结果如图 4 和图 5 所示,表明:HC 化合物及 CO 的转化效率基本不变,但载体体积增加会吸收更多的热量,冷启动过程载体升温速度变慢。因此,为控制汽车尾气排放,不同的发动机排量需要不同的载体体积相匹配。

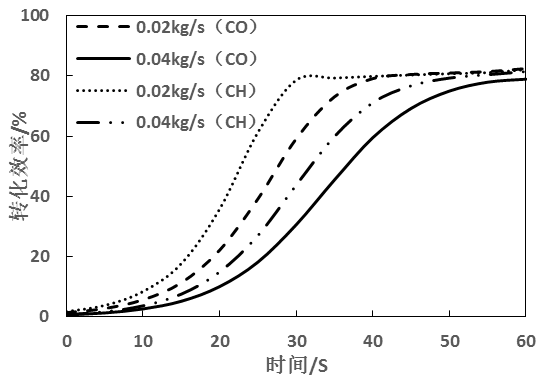


图 2 HC 化合物及 CO 转化效率

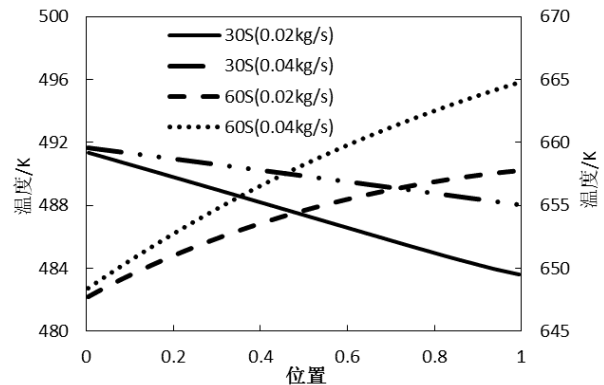


图 3 载体轴向温度

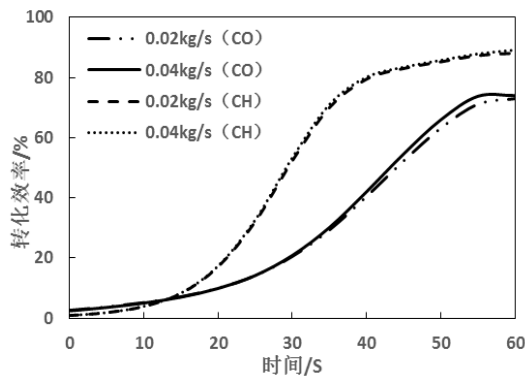


图 4 HC 化合物及 CO 转化效率

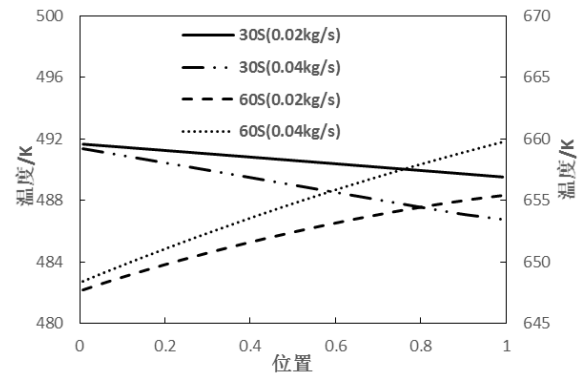


图 5 载体轴向温度

3.2 排气温度对转化效率及载体温度影响

分析排气起始温度分别 300K、320K、350K, 对 HC 化合物及 CO 转化效率及载体温度的影响。

计算结果,如图 6 和图 7 所示,表明:气体温度有利于载体升温速度及催化剂起燃,可提高污染物的转化效率。为了缩短催化剂起燃时间,控制冷启动过程的尾气排放,可采用控制催化器前端锥的金属外壳体积,减少气体从燃烧室到载体前热量损失,还可采用推迟点火角、电子节温器、智能格栅等措施,提高载体入口前的气体温度。

3.3 过量空气系数对转化效率及载体温度影响

分析过量空气系数对污染物转化效率及载体温度的影响,计算方案见表 4,计算结果如图 8、图 9、图 10 所示。表明:当 case1 空气过量系数较低(催化器入口氧含量低)时,HC 化合物与 CO 的氧化反应的氧化剂不足,因为 HC 化合物先被氧化为 CO,进而氧化为 CO_2 ,则 CO 的转化效率会下降,同理,可有充足的 CO 作为还原剂与 NO_x 反应,则 NO_x 的转化效率高;当 case2 过量空气系数在 1 附近(催化器入口氧含量适中)时,三种污染物转化效率均高;当 case3 过量空气系数较高(催化器入口氧含量高)时,HC 化合物和 CO 可充分被氧化,则转化效率高,同理,会因缺少还原剂与 NO_x 反应,则 NO_x 转化效率降低。

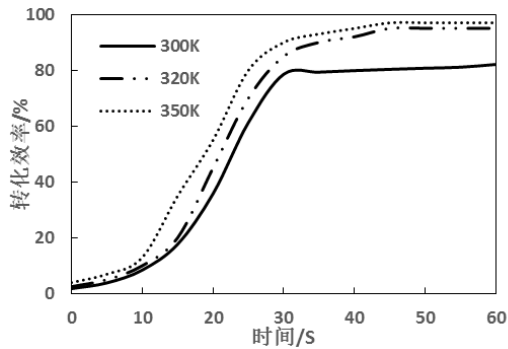


图 6 HC 化合物转化效率

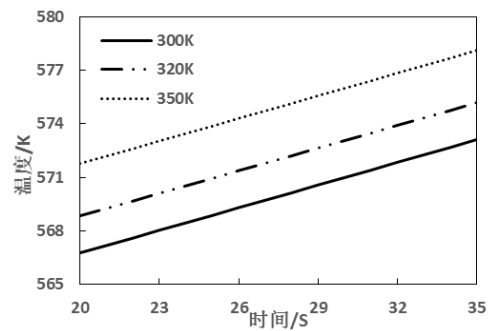


图 7 载体中心温度

表 4 计算方案

方案	case1	case2	case3
氧含量	0.090	0.013	0.020

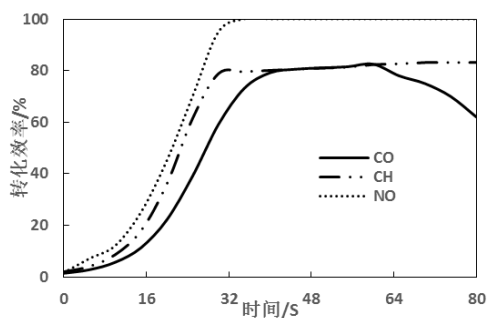


图 8 case1 污染物转化效率

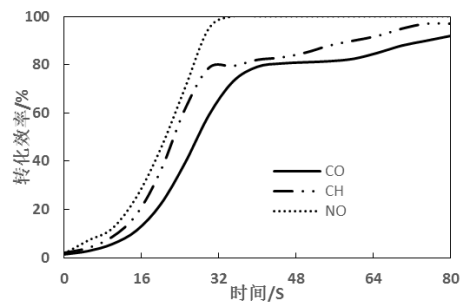


图 9 case2 污染物转化效率

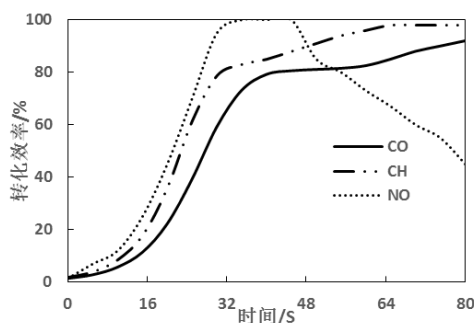


图 10 case3 污染物转化效率

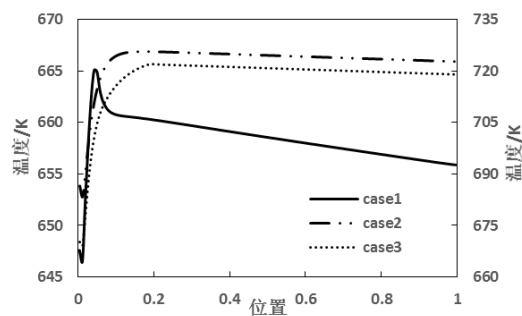


图 11 载体轴向温度

4. 结论

1) 发动机排量、排气温度、空气过量系数等气体参数对汽车尾气污染物的转化效率有着重要的影响。利用 GT-power 软件中催化反应仿真模型, 可进行气体参数对 HC 化合物、CO 及 NO_x 转化效率及载体温度定量化研究。

2) 不同的发动机排量需要不同的载体体积相匹配, 增大发动机排量需适当增加载体体积; 气体温度越高有利于催化剂起燃及冷启动过程污染物的排放; 过量空气系数需控制在 1 附近, HC 化合物、CO 及 NO_x 才可全部实现高效转化。

3) 当载体设计方案不变, 尾气排放无法满足国家排放法规时, 可采用优化燃烧策略, 比如冷启动过程, 可适当的调整缸内排气流量或温度, 加速催化剂起燃, 提高污染物转化效率, 催化反应仿真可为优化燃烧策略提供参数化方案。

参考文献

- [1] R. Holder, M. Bollig, D.R. Anderson, et al. A discussion on transport phenomena and three-way kinetics of monolithic converters[J]. Chemical Engineering Science, (61)2006, 8010-8027.
- [2] S. Cordiner, G. De Simone, V. Mulone. Influence of Washcoat Distribution on the Performance of Diesel Oxidation Catalysts[C]//SAE Paper. Università di Roma "Tor Vergata", 2007, 2007-01-4007.
- [3] Karthik Ramanathan, Chander Shekhar Sharma. Kinetic Parameters Estimation for Three Way Catalyst Modeling[J]. Industrial Engineering Chemistry Research, 2011, 50:9960-9979.
- [4] Tariq Shamim, Huixian Shen, Subrata Sengupta. Comparison of Chemical Kinetic Mechanisms in Simulating the Emission Characteristics of Catalytic Converters[C]//SAE Paper. The University of Michigan-Dearborn, 2001, 2000-01-1953.
- [5] Hyuk Jae Kwon, Joon Hyun Baik, Yong Tak Kwon et al. Detailed reaction kinetics over commercial three-way catalysts[J]. Chemical Engineering Science, (62)2007, 5042-5047.
- [6] Susan C. Lauderdale, Seth T. Nickerson, Jonathan D. Pesansky et al. Impact of Ceramic Substrate Web Thickness on Emission Light-Off, Pressure Drop, and Strength[C]//SAE Paper. Corning Incorporated, 2008, 2008-01-0808.
- [7] Rasto Brezny, Joseph Kubsh. Emission Performance of California and Federal Aftermarket TWC Converters[C]//SAE Paper. Manufacturers of Emission Controls Association, 2013,

2013-01-1298.