

CONVERGE 在发动机后处理系统分析中的应用

The application of CONVERGE in engine aftertreatment system

胡晓艳 张素英 张晓丽

(潍柴动力股份有限公司, 潍坊, 261061)

摘要: 随着排放法规要求的不断提高, 柴油车尾气排放要求日趋严格。选择性催化反应 (Selective Catalytic Reduction, SCR) 技术能有效降低 NO_x 排放, 近年来, 逐渐作为降低柴油机 NO_x 排放的有效措施之一。利用CONVERGE软件, 可以对SCR箱的性能和内部结晶情况进行评估。它包含详细的喷雾破碎, 蒸发, 液膜, 湍流, 共轭传热模型以及完全自动的网格生成功能。本文采用CONVERGE软件, 考虑尿素溶液在SCR箱内部的详细反应机理, 并结合混合器固体壁面和气流之间的流固耦合, 对双旋流混合器的SCR箱性能及内部结晶进行了评估, 并与实验结果进行了对比。

关键词: 尾气排放; SCR; CONVERGE

Abstract: Due to improving emission regulation requirement, the emission limit of diesel exhaust gas is becoming more and more strict. Selective Catalytic Reduction (SCR) technology can effectively reduce NO_x emission. In recent years, the SCR technology is regarded as one of the most effective ways to reduce NO_x . Using CONVERGE, we can evaluate the performance and urea deposit inside the SCR. It includes detailed spray break-up, evaporation, wall-film, turbulence, and Conjugate Heat Transfer (CHT) models as well as a completely automated mesh generation approach. Using the CONVERGE version, this article considers detailed reaction mechanism of urea solution inside SCR box. Combined with fluid-structure interaction between the solid wall surface of mixer and the airflow, the article evaluated the performance and urea deposit inside the double-wall SCR, and compared the evaluation to the experimental result.

Key words: emission; SCR; CONVERGE

1. 概述

随着柴油机在汽车中的应用日益广泛以及排放法规日益严格, 柴油机机内净化控制不能完全净化 NO_x 排放, 机外净化成为必不可少的部分。对于柴油机 NO_x 净化技术有多种方案, 其中选择性催化还原技术 (Selective Catalytic Reduction, SCR) 被认为是最好的脱氮技术。^[1]

SCR是将质量分数为32.5%的尿素水溶液(尿素占32.5%)以适当的用量, 喷入排气管中, 在排气管中发生水解及热解反应生成 NH_3 , NH_3 与尾气混合后一同进入SCR催化剂, 在催化剂的作用下, NH_3 和 NO_x 发生化学反应, 将 NO_x 还原成氮气和 H_2O 。

尿素水溶液的喷雾蒸发分解及其与尾气的混合过程十分复杂。由于 NH_3 才是还原 NO_x 的最终有效成分, 因此尿素能否及时分解并均匀地分布对于催化还原反应是很重要的。当液滴破碎、蒸发不充分或者不够迅速时, 未分解的尿素和一些分解中间产物会在管壁和混合器表面产生结晶。准确评估SCR箱氨的分布均匀性, 准确地预测尿素结晶的风险和位置对于SCR系统设计显得非常重要。

CONVERGE作为新一代的发动机分析工具, 因其全新的理念也为排放分析提供新的思路和方法, 可用于尾气后处理技术分析中。本文的分析运用了由美国Convergent Science Inc 开发的通用三维CFD软件CONVERGE2.4版本。在SCR箱系统中结晶沉积物为尿素分解的副产物, 结晶形成仅在很窄的温度范围[406K, 433K]。影响结晶的副产物CYA(三聚氰酸) 和Ammelide(酰胺) 只在高温条件下分解。

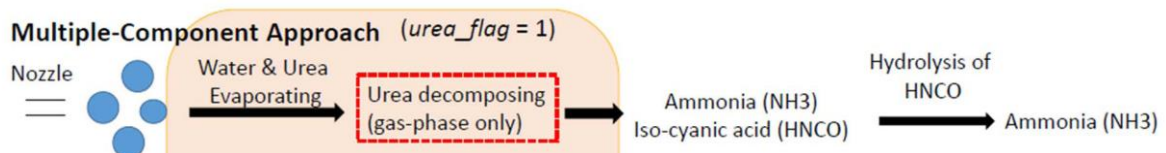
因此，对液膜温度的准确计算非常关键：V2.4改善了液滴撞壁模型Kuhnke, Wruck, Bai-Gosman，借助CHT可实现壁温的准确计算。对液膜蒸发和传热模型也进行了改进。

2. 模型设置

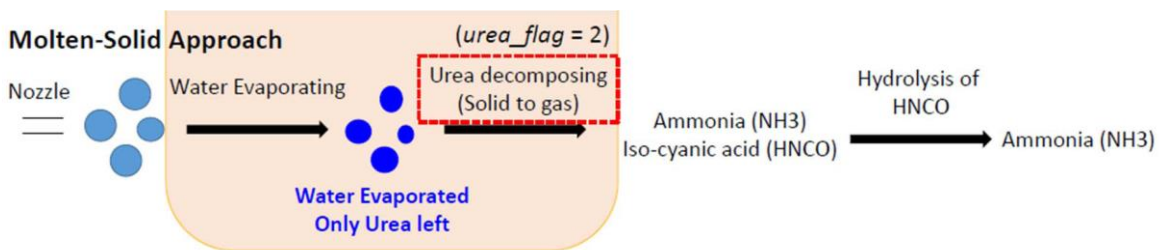
CONVERGE采用其专利网格切割技术，基于表面STL文件，在计算过程中实时自动的生成以六面体为主的高质量网格。也可根据自身温度、速度等变化进行网格自适应加密（Adaptive Mesh Refinement, AMR）。考虑SCR箱结构复杂，以及网格大小对计算精度的影响，算例采用了8mm的基础网格，并始终对混合器边界和喷雾区域进行加密，设置网格最小尺寸为1mm，对温度场设置，若有亚网格场数值超出用户自定义的值（设为0.5 m/s），网格会被自动加密到这些区域，直到亚网格场满足条件。本算例计算至准稳态（0.74物理时间），耗时30.7小时。

CONVERGE对SCR系统模拟可采用以下三种方法：

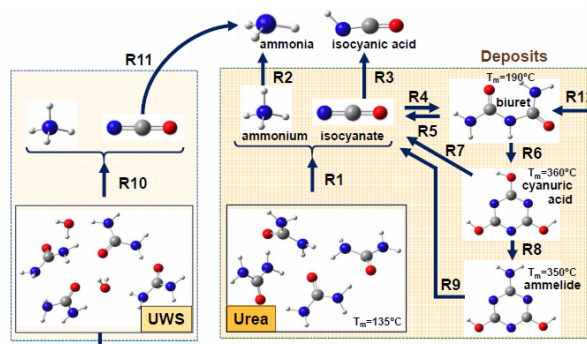
1.多组分蒸发方法（Multiple-Component Approach）：水和尿素分别蒸发，尿素分解成为气态 NH_3 和 HNCO 。



2.熔融固态方法(Molten-Solid Approach)：水先蒸发，（高温下）结晶状态的尿素分解为气态 NH_3 和 HNCO 。



3.详细分解反应方法(Detailed Decomposition Approach)



本文对SCR系统计算采用的是详细分解反应模型。采用详细反应模型时，在spray.in中设置urea_flag= 3，evap_source_flag= 1；在inputs.in中设置source_flag= 1。

因为SCR的性能直接取决于尿素-水溶液喷雾与混合气和壁面的相互作用以及尿素的分解，这些物理和化学现象分别通过多组分Frossling液滴蒸发模型^[2]，尿素分解机理^[3]，Kuhnke液膜/飞溅模型^[4]和液膜蒸发模型^[5]模拟。

Kuhnke液膜/飞溅模型考虑了壁面温度和液膜厚度对液膜飞溅范围的影响，液滴撞击壁面时的不同的K和T*值组合对应着四种可能的情况：反弹，热破解，产生液膜，飞溅。

其中 σ 是液滴表面张力， ρ 是密度， μ 是液体粘度， d 是液滴直径， U 是撞击速度，

$$K = \frac{(\rho d)^{3/4} U^{5/4}}{\sigma^{1/2} \mu^{1/4}}$$

T_{wall} 是壁面温度， T_{boil} 是液滴沸点。

$$T = \frac{T_{\text{wall}}}{T_{\text{boil}}}$$

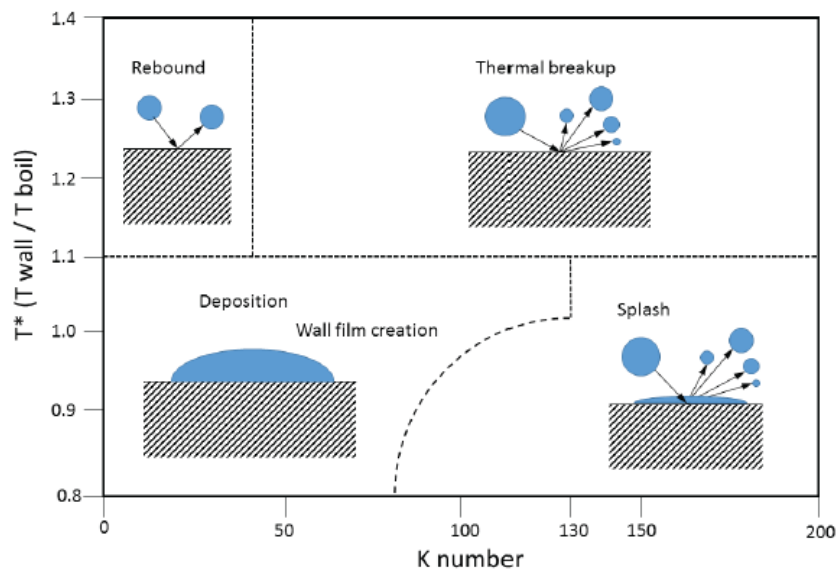


图1 Kuhnke模型液滴撞击壁面的四种结果中^[6]

本文所模拟的SCR系统结构如图2所示。端面喷射的尿素与从上部进入系统的尾气相互混合，并通过双旋流混合器壁面，在中段载体处反应，最终排出系统。算例使用的部分边界和初始条件如表1所示。实验中喷射和进气参数都是周期波动的，在模拟中为了简便，选用了平均值。

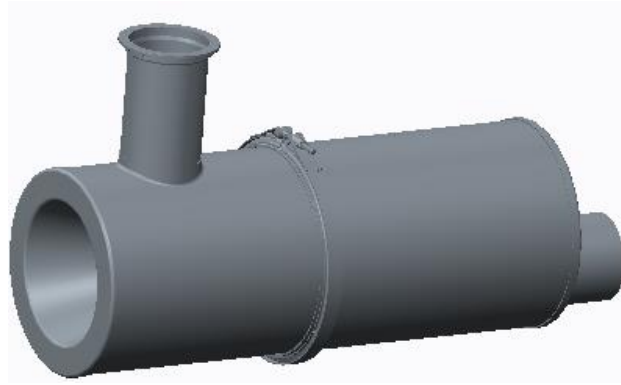


图2 所模拟的双旋流混合器SCR系统的几何结构

表1 边界和初始条件

进气温度 (K)	573
进气流量 (kg/s)	0.167
壁面温度 (K)	400
进气组分	真实台架数据
喷嘴直径 (μm)	190
喷嘴数	3
UWS喷射温度 (K)	300
UWS喷射压力 (bar)	9
UWS喷射速度 (m/s)	31
UWS喷射流量 (kg/s)	1.59×10^{-3}
UWS尿素质量分数	32.5%
基础网格尺寸 (mm)	8
加密的最小网格尺寸 (mm)	1 (速度场AMR)
空间分割	2阶精度有限体积
湍流模型	RANS: RNG $k-\epsilon$
喷雾破碎模型	TAB

3. 结果分析

压降是评价SCR箱性能的一个重要指标。在满足要求的前提下，SCR箱压降越小越好，本文模拟SCR系统的压降约为5kPa,与测试值基本一致。图3为本次算例的SCR箱截面的压力变化曲线图。从图中可以看出，在混合器附近压力变化波动较大。因此，混合器的结构对SCR箱性能影响较大。

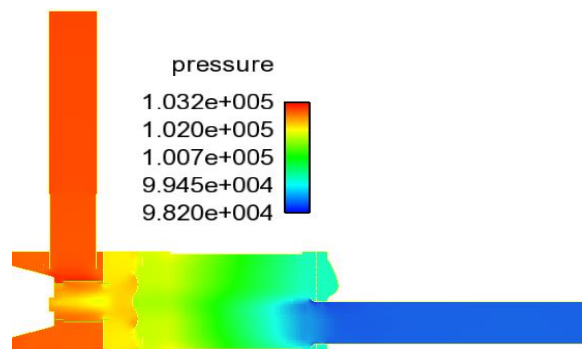


图3 SCR箱压力场分布云图

为了提高计算精度，体现液滴和壁面以及气液之间的相互作用，在喷雾周围和所有混合器壁面的都加密了网格。CONVERGE采用笛卡尔网格，通过控制体表面来控制角度离散化，先将整体分成若干正方体块（block）包住几何模型，再采用创新的网格切割边界技术在块内生成正交六面体网格，这样无须网格变形就能准确表征真实的几何结构。在运算过程中自动生成网格，不占用前处理时间。

在确保了壁面附近温度场，速度场充分求解后，准稳态时尿素-水溶液液滴分布，混合器壁面温度和液膜厚度如图4所示。壁面最低和最高温度相差30K左右。液滴撞击壁面的位置与壁面低温区，液膜厚度之间的对应关系是显而易见的。一般来说，液膜厚度越高，或壁面温度越低，越容易发生结晶。因此在预测结晶可能性时，孤立地分析一种物理量是不够的，需要综合考虑几种因素来评估结晶的可能性。

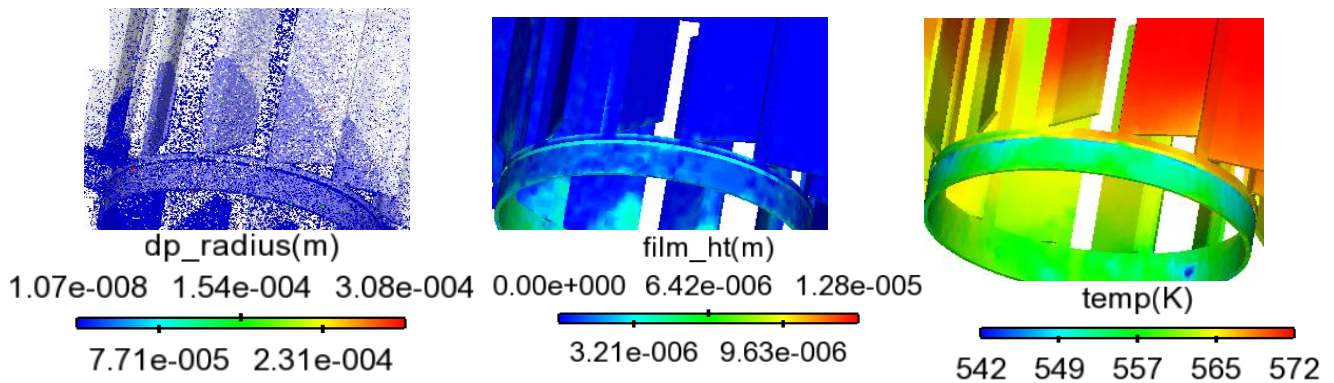


图4 准稳态时液滴分布，液膜厚度和混合器壁面温度

从图5可见，ECT循环10小时后拆解所拍摄的结晶位置，和仿真结果基本一致：轴向在混合器底部位置，径向在混合器上表面下侧附近。这个位置结晶形成的原因可能是尿素副产物到达此区域后，由于与壁面的热交换，温度逐渐降低，没能完全分解；并由于重力作用的影响，沉积在此位置形成结晶。



图5 实验结果与仿真结果结晶位置对比图

在验证了模型设置的准确性后，本文将分析SCR性能的关键参数——均匀性系数（Uniformity Index, UI），其定义是：

$$UI = 1 - \frac{\sum |y_{NH3} - y_{NH3\ mean}|}{2 * n * y_{NH3\ mean}}$$

上式中， y_{NH3} 和 $y_{NH3\ mean}$ 分别是载体进口截面某一点和平均的质量分数，是截面上取的点数。

从图6看出，载体进口截面上UI在0.3 s达到稳态0.98，表示氨气的分布非常均匀。

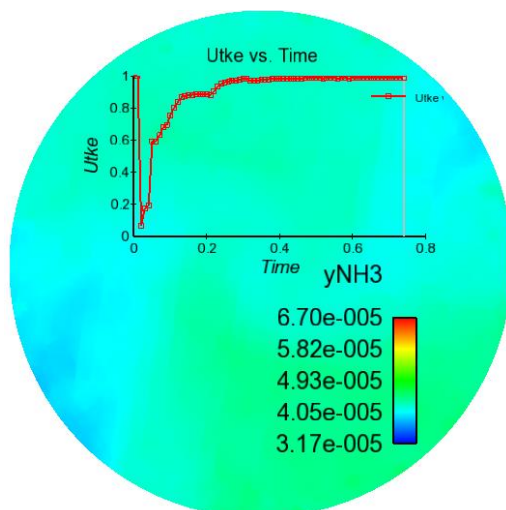


图6 准稳态时，催化剂进口表面均匀性系数UI

4. 总结

本文利用具有自动网格生成功能的CONVERGE软件模拟一款双旋流混合器结构的柴油机SCR系统尿素-水溶液的喷射过程以及与尾气和混合器壁面的相互影响。这些物理和化学现象分别通过多组分Frossling蒸发模型，尿素详细反应机理，Kuhnke液膜/飞溅模型和液膜蒸发模型模拟。

模拟所采用的网格尺寸及自适应网格加密基本上消除了网格对结果的影响，增强了结果的可信性。模拟的压降值得到实验值的验证。共轭传热模型显示混合器内圈壁面最低和最高温度相差40K左右。模拟结果显示，结晶位置主要发生在低温，高液膜厚度的区域，同时考虑重力作用的影响，仿真结果与实验值基本一致，验证了模型精度，为今后的设计优化奠定基础。

5 参考文献

- [1] 赵航 车用柴油机后处理技术 北京 中国科学技术出版社 2010
- [2] Amsden, A. A., O' Rourke, P. J., and Butler, T. D., "KIVA-II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays," Los Alamos National Laboratory Report No. LA-11560-MS, 1989.
- [3]. Yim, D. S., Kim, S. J., Baik, J. H., Nam, I., Mok, Y. S., Lee, J. W., Cho, B. K., Oh, S. H., "Decomposition of Urea into NH₃ for the SCR Process", Ind. EngChem. Res. 43 (1) (2004) 4856 - 4863.
- [4] Kuhnke, D., "Spray/Wall-interaction Modelling by Dimensionless Data Analysis," Ph.D. Thesis, Shaker Verlag, 2004, ISBN 3-3822-3539.
- [5] Richards, K. J., Senecal, P. K., and Pomraning, E., CONVERGE (v2.3), CONVERGEnt Science, Madison, WI (2015).
- [6] Richards, K. J., Senecal, P. K., and Pomraning, E., CONVERGE (v2.3), Convergent Science, Madison, WI (2015).