

基于 Converge 的柴油机 Urea-SCR 系统数值模拟

Numerical Simulation of the Urea-SCR System for Diesel Engine

Based on Converge.

陈雅娟, 陈英杰, 黄豪中

(广西大学 机械工程学院, 广西 南宁 530004)

摘要: 运用 CONVERGE 软件建立柴油机排气后处理系统三维模型, 模拟柴油机 Urea-SCR 系统混合器区域沉积物生成过程。针对柴油机排气后处理系统的 SCR 入口均匀性, 混合器前后压降以及尿素结晶、biuret (缩二脲)、CYA (三聚氰酸) 和 ammelide (三聚氰酸一酰胺) 进行了研究。结果表明: 整个排气后处理系统中液膜仅出现在混合器区域和喷嘴区域, 发现尿素分解副产物 biuret, CYA 和 ammelide 的产生主要受 HNCO 浓度、液膜温度和高度的影响, 液膜较厚的位置, 蒸发速率小, 尿素结晶的质量分数较小, 尿素分解副产物质量分数较大。

关键词: SCR; 均匀性; biuret; CYA; ammelide; 压降

Abstract: The 3-D computational model of diesel engine exhaust post-treatment system was built on the base of CONVERGE software to simulate the deposit formation process in the mixer area of diesel engine Urea-SCR system. The SCR inlet uniformity, the pressure drop of mixer, urea crystallization and three main by-products biuret, CYA (cyanuric acid) and ammelide of urea were studied in the exhaust post-treatment system of a diesel engine. The results show that the liquid film only appears in the mixer area and nozzle area in the whole exhaust post-treatment system. It is found that the production of biuret, CYA and ammelide by-products of urea decomposition is mainly affected by the concentration of HNCO, the temperature and height of liquid film. Thicker the liquid film and the smaller rate of evaporation, and the mass fraction of urea crystallization will be smaller, and the mass fraction of urea decomposition by-product will larger.

Key words: SCR; uniformity; biuret; CYA; ammelide; pressure drop

1. 引言

目前, 选择性催化还原 (SCR) 技术是降低尾气中 NO_x 含量的最有效方法之一^[1]。SCR 系统通过向排气管内喷射 32.5% 的尿素水溶液, 尿素水溶液在排气管中与废气混合, 经过蒸发、热解后产生还原剂 NH_3 , NH_3 在催化剂的作用下与 NO_x 反应, 最终将 NO_x 转化为 N_2 和水^[2]。通常, 由于受到排气温度、排气流量、尿素流量和柴油机排气后处理结构等多种因素的影响, 尿素不能彻底分解为 NH_3 和 HNCO , 而是不断累积, 堆积在排气管中形成沉积物, 或在不同温度下经过一系列复杂的化学反应生成 biuret (缩二脲)、CYA (三聚氰酸) 和 ammelide (三聚氰酸一酰胺) 等沉积物^[3]。

尿素沉积物的形成是一个不断积累的过程, 在试验中观察分析沉积物需要非常昂贵的成本, 因此, 基于 CFD 方法的尿素 SCR 后处理系统的研究设计成为近几年的热点。Betageri^[6]利用尿素直接分解模型对尿素沉积物过程进行模拟, 提出尿素沉积物与喷雾特性、排气温度和排气流量的关系, 预测了两个工况的尿素沉积物位置。Zheng^[7]进一步从液膜高度和液膜热通量两个方面预测尿素沉积风

险，并引入一个修正因子 α ，建立了一个评估尿素沉积风险函数，忽略了HNCO浓度等的影响。上述两个研究都存在一个不足之处，没有使用尿素详细分解机理进行预测。2018年，钱枫^[2]等人通过耦合AVL Fire和Boost仿真软件定量计算了排气管壁面沉积物生成率，发现对沉积物生成率影响权重较大的五个因素分别为尿素流量、空速、排气温度、管壁导热系数和喷孔数，但是该研究缺少对沉积物的定性分析和沉积出现位置的分析。

本文利用CONVERGE软件和一个包含12步化学反应的尿素详细分解机理，针对某四缸柴油机排气后处理系统性能进行模拟计算。主要计算SCR入口均匀性，混合器前后压降，液膜特性和HNCO浓度，尿素结晶、biuret、CYA和ammelide的质量，分析不同时刻尿素沉积物的生成机理。研究结果对柴油机排气后处理系统的设计工作具有重要理论指导意义。

2. 模型的建立

2.1 三维模型

该四缸柴油机后处理系统采用S型结构，主要包括氧化型催化转化器（DOC）、柴油机颗粒捕集器（DPF）、选择性催化还原器（SCR）和氨逃逸催化器（ASC），如图1所示。尿素喷嘴位于混合器前，混合器主要由旋流片、环形挡板、多孔锥形管和叶片等结构组成。尿素喷雾首先在旋流片区域与废气混合，形成湍流并产生强烈扰动；在环形挡板的阻挡下，流体进入多孔锥形管，多孔锥形管起到导流和降噪的作用；最后流经叶片结构，以提高气体均匀性。

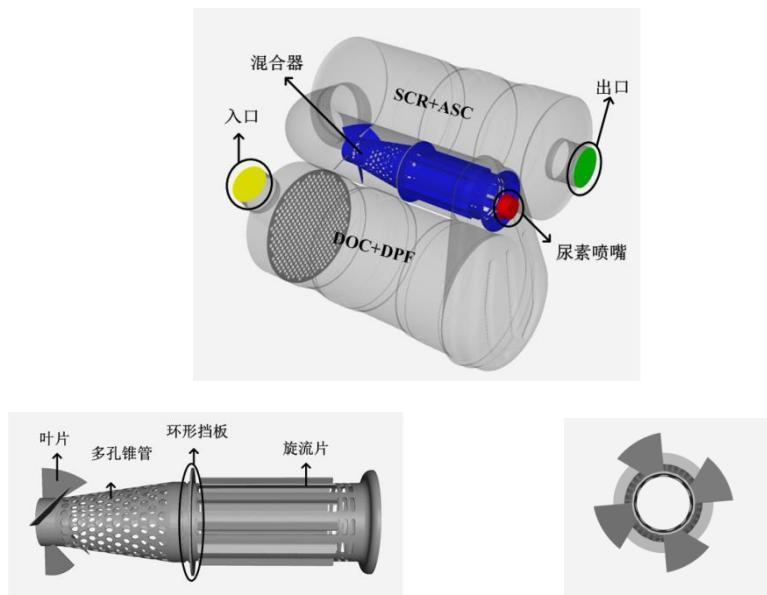


图1. 柴油机排气后处理系统

使用CONVERGE软件对排气后处理系统进行数值模拟。综合考虑计算精度和计算时长，设置排气后处理系统的基础网格尺寸为8mm，在整个计算域内喷嘴、混合器和混合管段基于速度变化率自适应网格加密。

2.2 物理模型

CONVERGE软件通过有限体积法求解守恒方程，通过算子分裂法(PISO)求解输运方程。湍流模型选用RNG k- ϵ ；为了描述尿素液滴的分裂雾化过程，假设

尿素喷雾液滴初始粒径遵循 Rosin Rammler 分布, 采用 TAB (Taylor analogy breakup) 模型描述尿素液滴的变形; 采用 Kuhnke 模型模拟尿素液滴与壁面相互作用的过程; 采用 Frossling drop evaporation with droplet boiling 模型描述液膜与尿素液滴的蒸发过程。

2.3 尿素详细分解模型

表 1 尿素详细分解机理

| Reaction | $Ai(s^{-1})$ | $Ei(kJ \cdot mol^{-1})$ |
|--|-----------------------|-------------------------|
| (R1) $urea \rightarrow NH_4^+ + NCO^-$ | 8.5×10^6 | 84 |
| (R2) $NH_4^+ \rightarrow NH_3(g) + H^+$ | 1.50×10^2 | 40 |
| (R3) $NCO^- + H^+ \rightarrow HNCO(g)$ | 6.57×10^2 | 10 |
| (R4) $urea + NCO^- + H^+ \rightarrow biuret$ | 7.87×10^{14} | 115 |
| (R5) $biuret \rightarrow urea + NCO^- + H^+$ | 1.50×10^{24} | 250 |
| (R6) $biuret + NCO^- + H^+ \rightarrow cya + NH_3(g)$ | 2.81×10^{18} | 150 |
| (R7) $cya \rightarrow 3NCO^- + 3H^+$ | 1.50×10^{19} | 260 |
| (R8) $cya + NCO^- + H^+ \rightarrow ammelide + CO_2$ | 3.48×10^5 | 35 |
| (R9) $ammelide \rightarrow 2NCO^- + 2H^+ + HCN(g) + NH(g)$ | 6.00×10^{14} | 220 |
| (R10) $urea(aq) \rightarrow NH_4^+ + NCO^-$ | 1.20×10^8 | 84 |
| (R11) $NCO^- + H^+ + H_2O(g) \rightarrow NH_3 + CO_2(g)$ | 5.62×10^9 | 59 |
| (R12) $urea(aq) + NCO^- + H^+ \rightarrow biuret$ | 3.93×10^{14} | 115 |

在排气后处理系统中, 尿素液滴与壁面相互作用时, 在特定的条件下形成液膜, 液膜在蒸发的同时发生一系列复杂的化学反应, 生成 biuret、CYA 和 ammelide 等尿素分解副产物, 并沉积在排气管内。上述沉积物随着时间的增长在排气管中不断堆积, 会导致发动机排气背压升高, 性能恶化。本研究采用 Urea deposit model 模拟液膜中发生的一系列复杂反应, 该模型参考 Ebrahimian^[4]等人提出的 12 步尿素详细分解机理, 其中前 9 步反应主要描述了尿素在干燥介质中的热分解, 后 3 步反应主要描述了尿素在溶液中的热分解, 同时考虑了 biuret、CYA 和 ammelide 三种主要副产物的生成。

3. 数值仿真结果分析

3.1 均匀性与压降分析

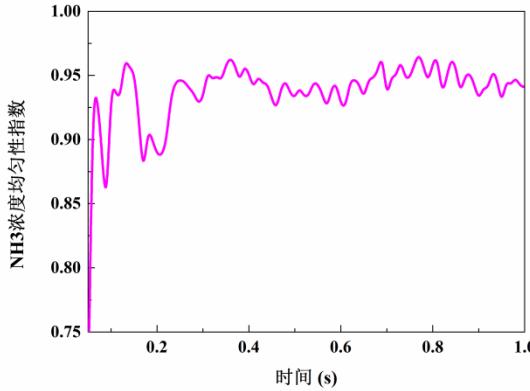


图 2. NH3 浓度均匀性指数

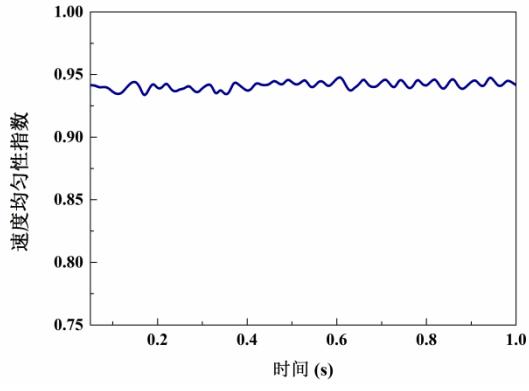


图 3. 速度均匀性指数

图 2、3 分别为整个计算域内 SCR 入口的 NH3 浓度和速度均匀性指数。NH3 浓度均匀性指数在前 0.3s 内波动较大，0.3 秒后基本稳定在 0.93~0.97。速度均匀性指数在整个模拟过程中没有大幅波动，基本稳定在 0.93~0.95。

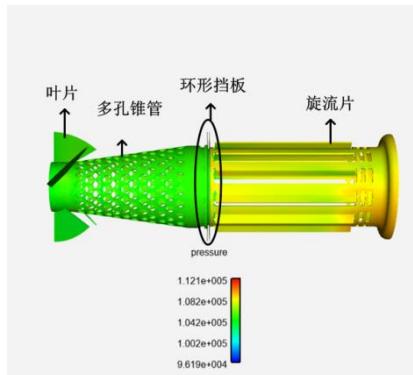


图 4. 混合器的压力分布图

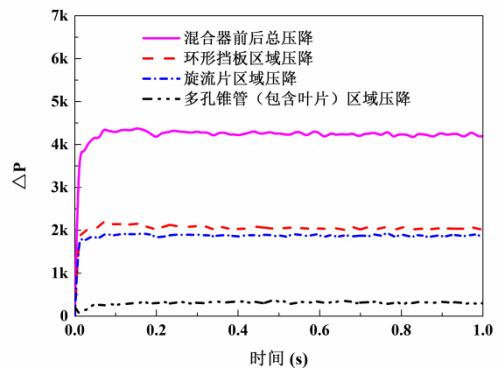


图 5. 混合器的总压降和各部分压降

图 4 展示了 0.98s 时混合器上的压力分布，图 5 为整个计算域内混合器前后总压降及混合器结构中环形挡板、旋流片和多孔锥管（包含叶片）三个区域的压降。由图 4 可以明显看出环形挡板区域的压降最大；由图 5 的曲线可知，0.2s 后混合器前后总压降稳定在 4.0kPa~4.3kPa，环形挡板区域压降稳定在 2.0kPa~2.2kPa，旋流片区域压降稳定在 1.8kPa~1.9kPa，锥管（包含叶片）区域压降稳定在 0.28kPa~0.35kPa。因此，混合器前后的压降主要由环形挡板导致，其次是旋流片，锥管（包含叶片）区域的压降较小。

3.2 沉积物生成机理分析

本研究中的 3D 数值模拟耦合了一个包含 12 步化学反应的尿素详细分解机理，考虑了尿素分解的三种副产物：biuret、CYA 和 ammelide。由于液膜是尿素结晶和尿素分解副产物的前驱物，所以对液膜属性的分析至关重要。本文模拟结果展示了排气后处理系统中形成液膜的区域、高度、质量以及液膜中尿素结晶的区域和质量、液膜中 biuret、CYA 和 ammelide 出现的区域及质量等。

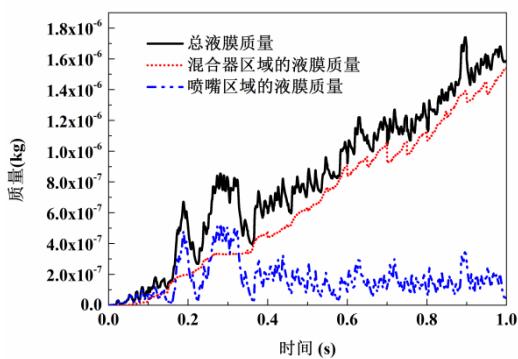


图 6. 总液膜质量、混合器区域液膜质量和喷嘴区域液膜质量

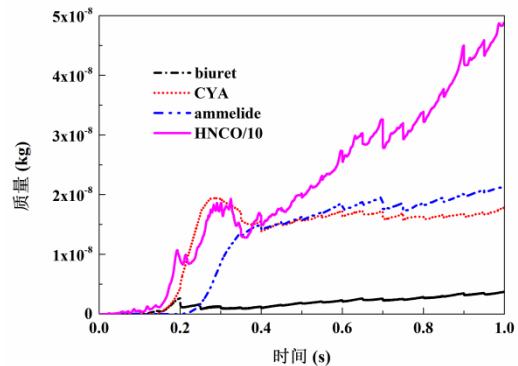


图 7. HNCO、biuret、CYA 和 ammelide 总质量

仿真结果显示,在整个排气后处理系统中液膜仅出现在混合器区域和喷嘴区域。因此,本文仅给出这两个区域的液膜质量及总质量,如图 6 所示。可以看到混合器区域的液膜质量在整个计算域内成递增趋势,而喷嘴区域的液膜质量在 0.36s 之前出现较大波动并出现峰值,0.36s 之后波动减小。图 7 给出整个计算域中 HNCO、biuret、CYA 和 ammelide 的质量,由图可知,三种尿素分解副产物的生成与 HNCO 相关,当有 HNCO 生成之后,通过反应 R4、R6、R8 和 R12(见表 2),biuret、CYA 和 ammelide 依次在 0.1s、0.14s 和 0.2s 生成。由尿素详细分解机理可知,biuret、CYA 和 ammelide 的生成除了与 HNCO 有关外,还与液膜特征参数有关,所以结合液膜特征参数分析 biuret、CYA 和 ammelide 的生成机理是有必要的。

3.2.1 混合器部分沉积物生成机理分析

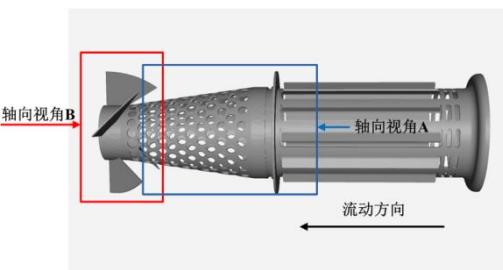


图 8. 观察混合器沉积物的视角示意图

本研究的混合器结构较为复杂,由旋流片、环形挡板、锥管及叶片组成。模拟结果显示,旋流片区域无液膜形成,所以本文仅对不同时刻环形挡板、多孔锥管及叶片区域的尿素结晶、尿素分解副产物和液膜特征参数进行分析。分析时,以轴向视角 A 观察环形挡板及锥管区域沉积物,以轴向视角 B 观察叶片区域沉积物,如图 8 所示。

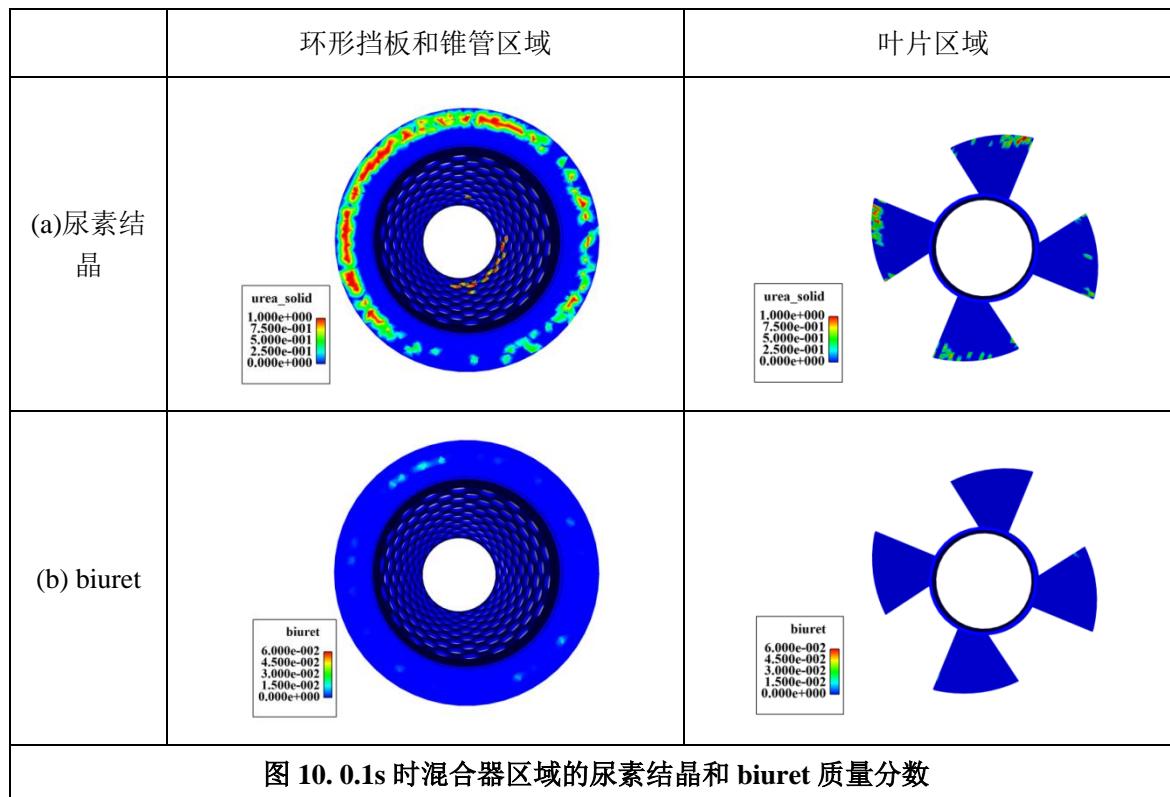
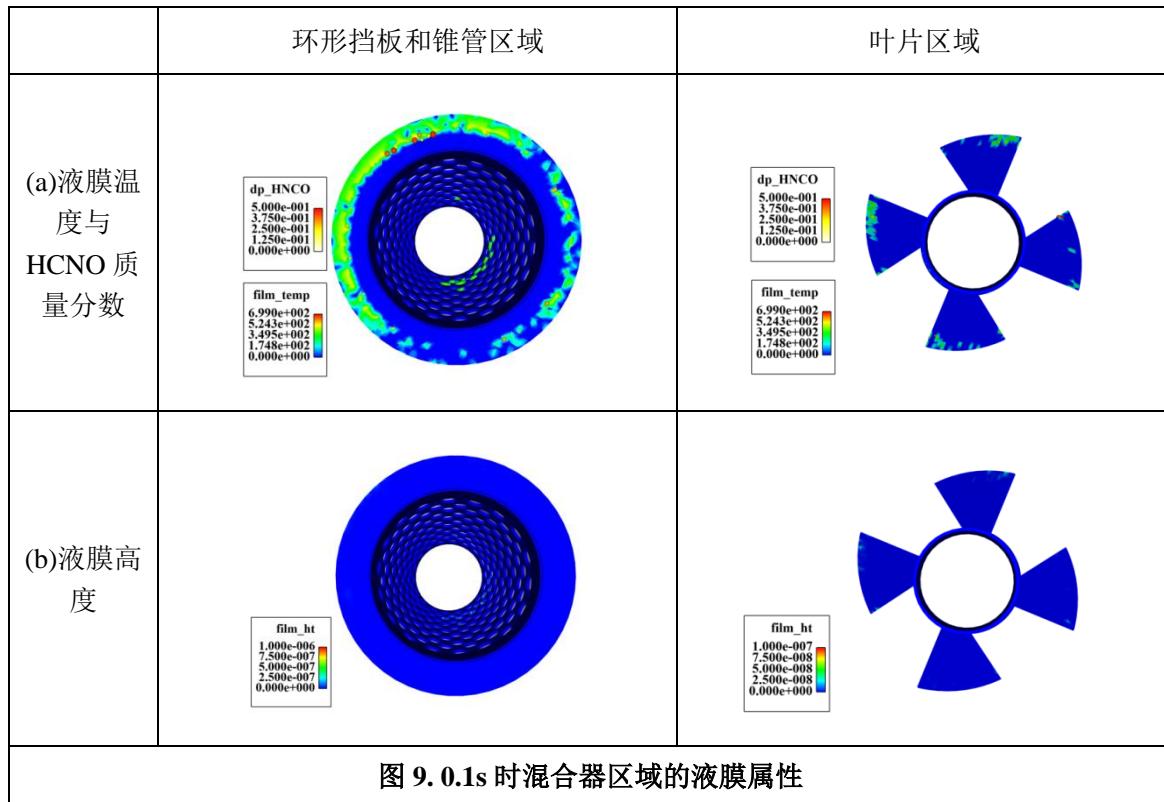
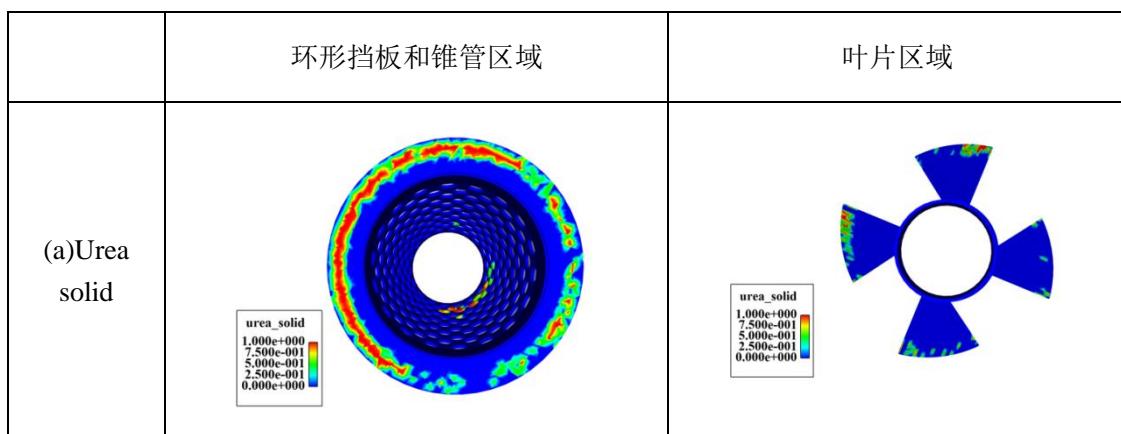
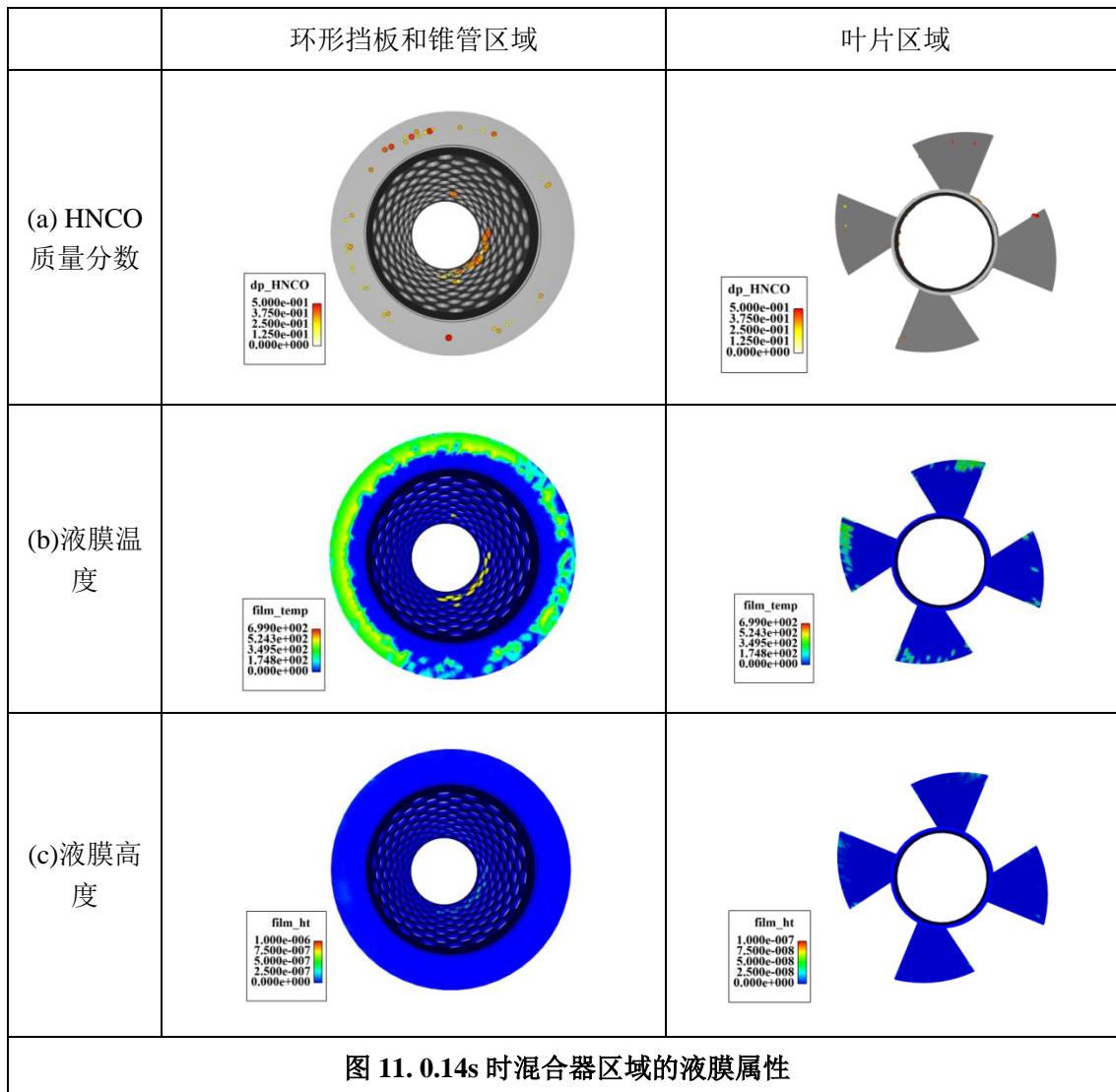


图 9、10 示出 0.1s 时环形挡板和锥管区域、叶片区域的 HNCO 质量分数（球的大小与 HNCO 质量分数大小成正比）、液膜温度和高度、尿素结晶和 biuret 质量分数。

由这两个图可以看到，锥管区域的液膜温度低于 400K，尿素还未发生分解，

没有 HNCO 生成，故在 0.1s 时锥管区域液膜中只有尿素结晶，没有其他尿素分解副产物。在挡板、叶片区域，液膜温度高于 420K，尿素通过反应 R1~R3 发生分解，HNCO 生成；大约在 433K，尿素通过反应 R4 和 R12 生成副产物 biuret。此时液膜温度仍低于 CYA 和 ammelide 生成的温度窗口，故没有观察到 CYA 和 ammelide。



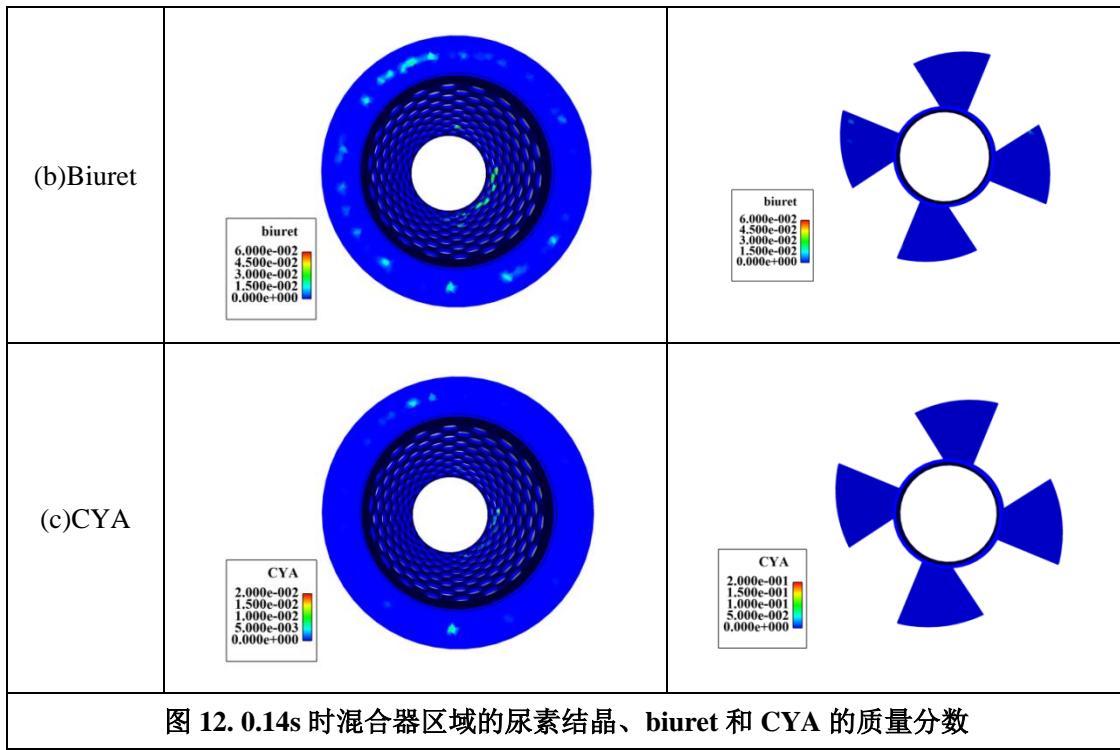
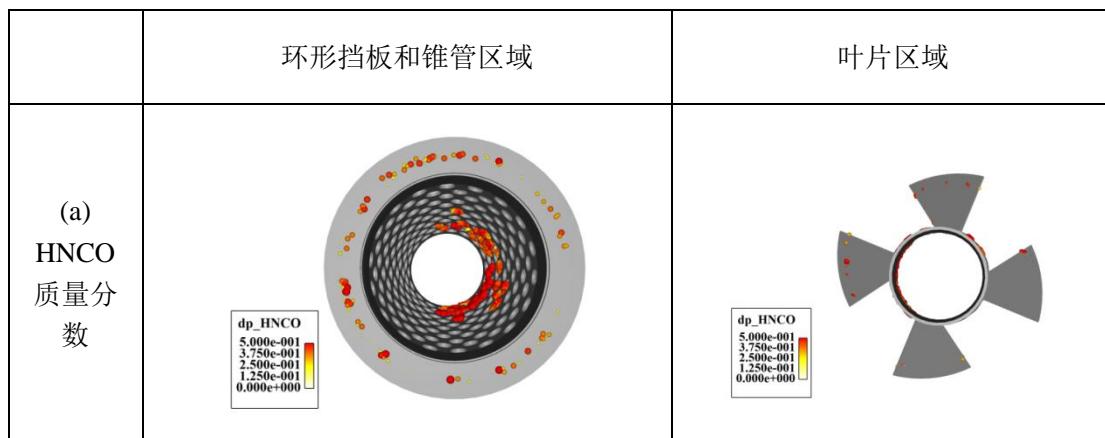
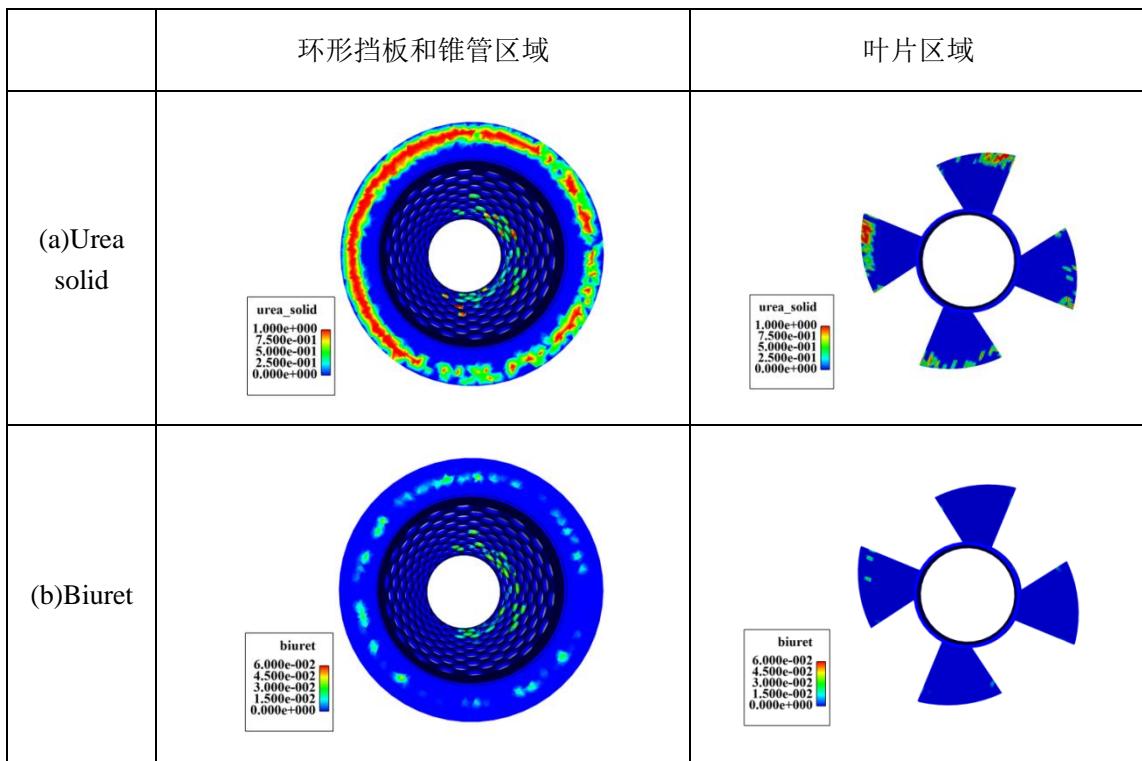
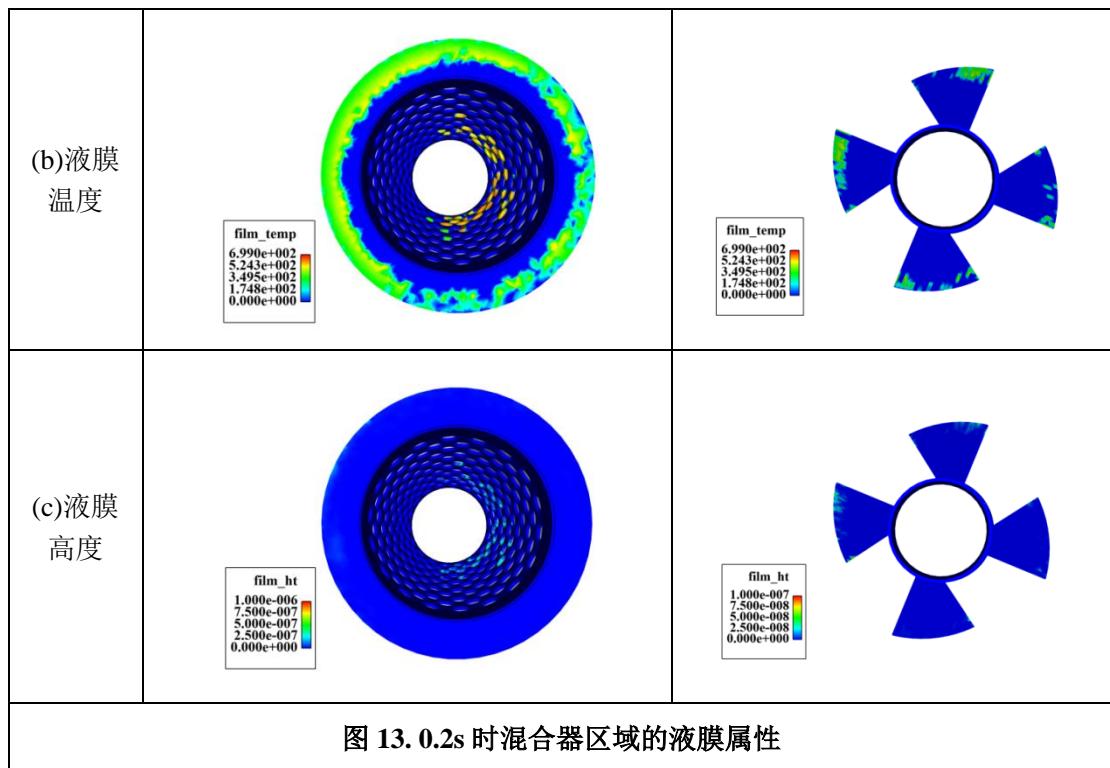


图 12. 0.14s 时混合器区域的尿素结晶、biuret 和 CYA 的质量分数

图 11、12 给出 0.14s 时环形挡板和锥管区域、叶片区域的 HNCO 质量分数 (球的大小与 HNCO 质量分数大小成正比)、液膜温度和高度、尿素结晶、biuret 和 CYA 质量分数。

由这两个图可知, 0.14s 时, 混合器三个区域的液膜数量和厚度均有所增加, 在液膜较厚的区域, 尿素结晶质量分数少, 而 biuret 和 CYA 的质量分数大, 说明在液膜较厚的位置容易生成尿素分解副产物。由图 11 还可以看到, 在 0.14s 时锥管区域的液膜大部分处于 500K 以上; 在锥管、挡板和叶片液膜温度大于 420K 的区域, 尿素通过反应 R1~R3 生成 HNCO; 在 HNCO 质量分数大于 0.3 和液膜温度处于 420K~520K 的区域, 尿素通过反应 R4 和 R12 生成 biuret; 在 HNCO 质量分数大于 0.35 和液膜温度处于 450K~520K 的区域, biuret 通过反应 R6 生成 CYA; 没有观察到 ammelide 的出现。





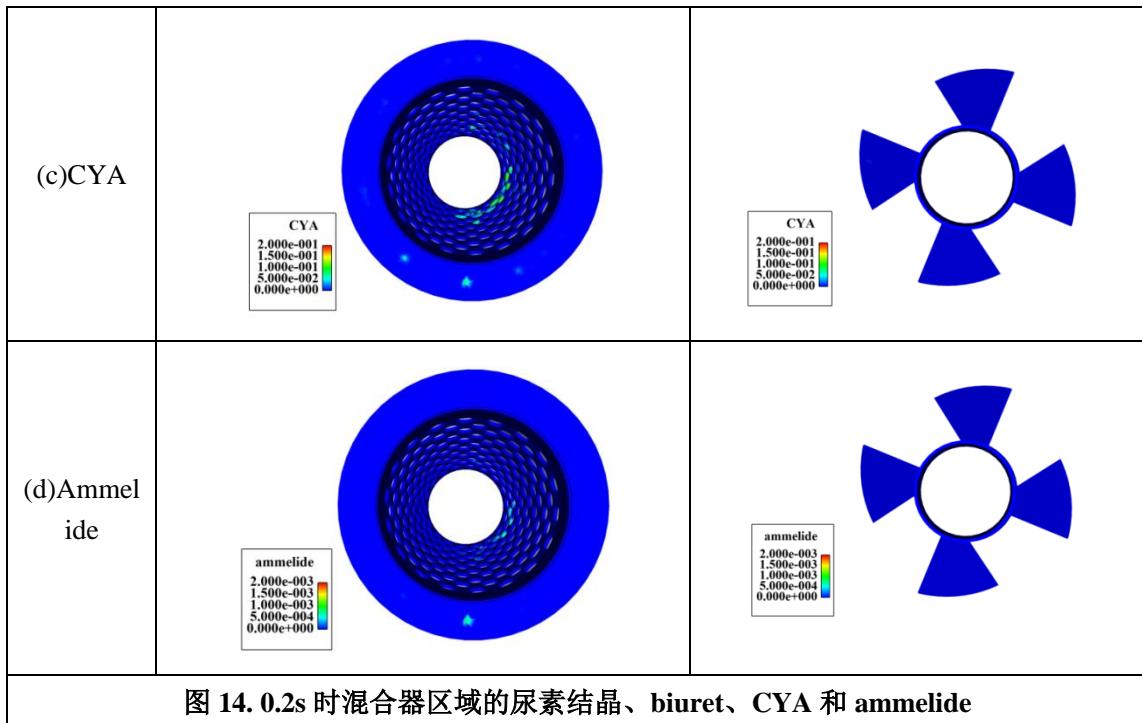
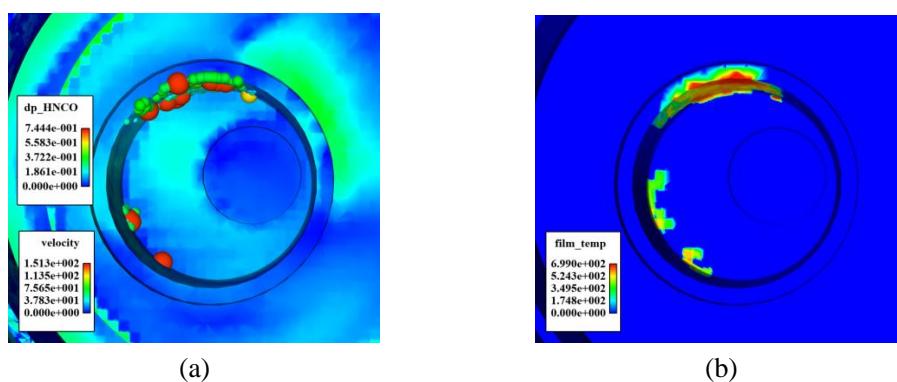


图 14. 0.2s 时混合器区域的尿素结晶、biuret、CYA 和 ammelide

图 13、14 为 0.2s 时环形挡板和锥管区域、叶片区域的 HNCO 质量分数（球的大小与 HNCO 质量分数大小成正比）、液膜温度和液膜高度、尿素结晶、biuret、CYA 和 ammelide 的质量分数。

从这两个图可知，0.2s 时锥管、挡板和叶片区域液膜温度范围分别为 350K~600K, 230K~520K, 200K~520K；液膜温度升高，尿素不断分解，HNCO 的数量和质量分数均增加，更多的 biuret 和 CYA 生成；同时，ammelide 在液膜温度大于 500K 且 HNCO 质量分数为 0.5 的区域通过反应 R8 生成。

3.2.2 喷嘴部分沉积物分析



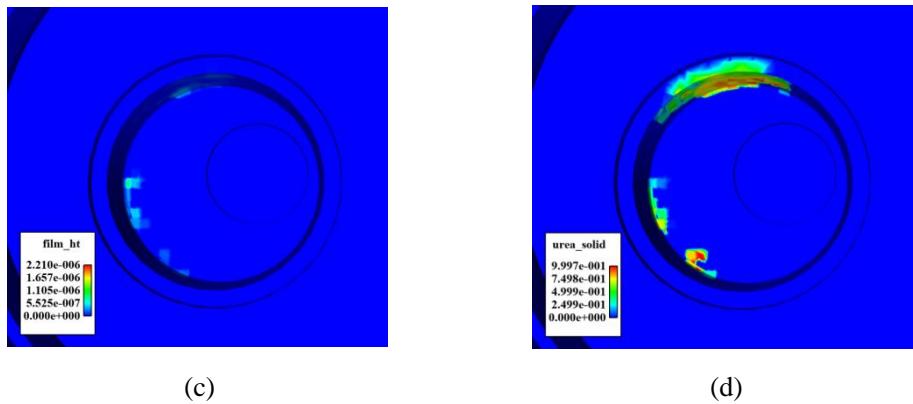


图 15 1s 喷嘴区域的液膜属性与尿素结晶质量分数

图 15 给出 1s 时喷嘴区域的速度, HNCO 质量分数 (球的大小与质量分数成正比), 液膜温度、高度和尿素结晶质量分数。由于喷嘴区域 biuret、CYA 和 ammelide 数量很少, 此处不作讨论。由图可知, 当喷嘴区域液滴被困住发展成液膜时, 在液膜温度大于 420K 的区域, 尿素通过反应 R1~R3 分解成 HCNO, 由于该区域的液膜温度较低, 这三个反应速度较慢, HNCO 质量分数较小。

4. 结论

(1) 整个排气后处理系统中液膜仅出现在混合器区域和喷嘴区域, 液膜较厚的区域, 液膜蒸发速率较低, 尿素结晶的质量分数较低, 但副产物的质量分数较大。

(2) 液膜温度大于 420K 的区域, 尿素分解生成 HNCO; 在 HNCO 质量分数大于 0.3 和液膜温度处于 420K~520K 的区域, 尿素通过反应 R4 和 R12 生成 biuret; 在 HNCO 质量分数大于 0.35 和液膜温度处于 470K~520K 的区域, biuret 通过反应 R6 生成 CYA; ammelide 在液膜温度大于 520K 且 HNCO 质量分数为 0.5 的区域通过反应 R8 生成。

(3) 混合器前后压降主要由环形挡板导致, 优化后压降减小的主要原因是在挡板处布置孔, 叶片数量的改变对混合器前后压降的影响很小。

5. 参考文献

- [1] Tan L , Feng P , Yang S , et al. CFD studies on effects of SCR mixers on the performance of urea conversion and mixing of the reducing agent[J]. Chemical Engineering & Processing Process Intensification, 2018, 123:82-88.
- [2] 钱枫, 吕林, 杨栋. 柴油机 SCR 系统排气管壁沉积物影响因素仿真[J]. 内燃机学报, 2018.
- [3] 苏庆运, 冯廷智, 郑贯宇, et al. 柴油机 SCR 催化转化器的数值模拟[J]. 内燃机学报, 2017(01):57-63.
- [4] Ebrahimian V, Nicolle A, Habchi C. Detailed modeling of the evaporation and thermal decomposition of urea - water solution in SCR systems[J]. AIChE Journal, 2012, 58(7): 1998-2009.
- [5] Betageri V, Rajagopalan M, Murthy S D, et al. Effects of Diesel Exhaust Fluid

(DEF) Injection Configurations on Deposit Formation in the SCR System of a Diesel Engine[R]. SAE Technical Paper, 2016.

[6]Zheng G. CFD Modeling of Urea Spray and Deposits for SCR Systems[R]. SAE Technical Paper, 2016.