

选择性催化还原混合器及整流器的设计与结构优化

陈贵升¹, 杨锐敏¹, 和志高², 黄 震¹

(1. 昆明理工大学 交通工程学院, 昆明 650500; 2. 云南省德宏职业学院, 德宏 678400)

Design and Structure Optimization of Selective Catalytic Reduction Mixer and Rectifier

CHEN Guisheng¹, YANG Ruimin¹, HE Zhigao², HUANG Zhen¹

(1. School of Traffic Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650500, China;

2. Dehong Vocational College of Yunnan Province, Dehong 678400, China)

Abstract: A diesel engine aftertreatment test bench was built. A numerical simulation model of selective catalytic reduction(SCR) was established with the computational fluid dynamics(CFD) software, and the reliability of the simulation model was verified. Four mixers and three rectifier schemes were designed and their effects on NH_3 distribution and NO_x conversion efficiency in SCR system were studied. First the effect of different mixers on NH_3 distribution and NO_x conversion efficiency in the SCR system was investigated. The results show that the mixer can improve the uniformity of NH_3 distribution and the conversion efficiency of NO_x in the SCR catalyst, and the M2 mixer having seven blades with a thickness of 2 millimeters and an angle of 30° between the blades and their radial directions is the best. Then, the effects of combination of M2 mixer with different rectifiers on NH_3 distribution and NO_x conversion efficiency in SCR systems are analyzed. The results show that the combination of the mixer and rectifier can optimize the flow field and improve the NO_x conversion efficiency, and D1 rectifier makes the SCR system have higher NH_3 distribution uniformity and NO_x conversion efficiency.

摘要: 通过搭建柴油机后处理试验台架,运用计算流体力学(CFD)对选择性催化还原系统(SCR)内的反应进行仿真计算,设计 4 种混合器和 3 种整流器方案,研究了不同混合器及整流器结构对 SCR 系统内 NH_3 分布及 NO_x 转化效率的影响。结果表明:混合器能够有效改善 SCR 内 NH_3 分布均匀度及 NO_x 的转化效率。综合分析,有 7 个厚度均为 2 mm 的叶片且叶片与径向方向的夹角均为 30° 的方案 M2 的混合器结构设计较优;气流受到入口扩张管的扩张作用之后,经过方案 D1 的整流器,使得 SCR 系统具有更高的 NH_3 分布均匀度和 NO_x 转化效率。混合器和整流器结合可以实现流场的优化,提高 NO_x 转化效率。

关键词: 选择性催化还原;混合器;整流器; NO_x 转化效率;数值仿真

Key words: selective catalytic reduction(SCR); mixer; rectifier; NO_x conversion efficiency; numerical simulation

DOI: 10.13949/j.cnki.nrjgc.2020.02.007

中图分类号: TK442

收稿日期: 2019-09-08

修回日期: 2019-10-09

基金项目: 国家自然科学基金项目(51866004)

Foundation Item: National Natural Science Foundation of China(51866004)

作者简介: 陈贵升(1979—),男,副教授,博士,主要研究方向为内燃机燃烧及排放控制技术, E-mail: cgs_yly@163.com;

黄 震(通信作者), E-mail: 1329627964@qq.com。

0 概述

柴油机燃烧易形成高温过浓区及高温火焰区,高温火焰区内富氧环境有利于氮氧化物(NO_x)生成,而 NO_x 对环境和人类健康产生严重危害。随着排放法规日趋严格,选择性催化还原(selective catalytic reduction, SCR)已经成为排放后处理系统中的关键技术,其通过喷射尿素水溶液蒸发热解产生的氨气(NH_3)将 NO_x 还原为 N_2 ^[1-2]。其中催化器入口截面 NH_3 分布均匀性对 NO_x 的转化率有重要影响^[3]。SCR系统中,混合器是提高 NH_3 分布均匀性和尿素液滴蒸发分解效率的一种有效装置^[4],能够显著提高催化器前流动及气体浓度均匀性,并有助于降低尿素沉积物生成风险^[5]。

国内外对SCR系统的研究很多,如:文献[6]通过喷雾的数值模型,分析了喷雾液滴在有无混合器的直管中的蒸发速率及其与混合器叶片之间的相互作用;文献[7]对某种集成式SCR混合器进行了数值模拟研究;文献[8]使用计算流体力学(CFD)软件仿真分析了网状混合器对 NH_3 分布和系统压力损失的影响;文献[9]对两个具有不同叶片角度的两种不同双级混合器进行试验比较,研究两种混合器性能,分析混合器叶片角度对均匀性指数的影响,以比较和构思当前应用的最佳混合器设计;文献[10]研究了喷嘴喷射角度 α 、催化器扩张角 β 和混合器及其安装位置等因素对SCR系统的 NO_x 转化率、 NH_3 分布均匀性和液膜质量等的影响;文献[11]选择具有2种不同数量叶片的混合器和3种不同长度的分解管,调整混合器与分解管之间的安装顺序,使用数值模拟技术和试验测量进行系统分析;文献[12]使用田口方法(Taguchi方法)进行混合器优化,分析混合器叶片数、角度及混合器与喷射器距离对SCR系统性能的影响;文献[13]使用CFD仿真分析了带混合器的SCR系统中的排气流动特征和 NH_3 分布特征。

为了同时提高SCR系统 HN_3 分布的均匀性及 NO_x 转化效率,国内外学者主要是基于CFD仿真,分别研究混合器叶片角度、混合器叶片数量、混合器结构、混合器距离尿素喷射位置的距离、催化器扩张角等对排气流动特征、 NH_3 分布特征及 NO_x 转化效率的影响。本文以4缸直列式高压共轨柴油发动机为研究对象,搭建了发动机加装氧化催化器(diesel oxidation catalyst, DOC)+催化型颗粒过滤器(catalyzed diesel particulate filter, CDPF)+选择性催化还原(selective catalytic reduction, SCR)后处理系统的试验台架,采用SCR台架试验与三维CFD仿真软件相结合的方式,对SCR内 NO_x 转化效率和

NH_3 分布均匀性进行了研究。在前人的研究基础上,对SCR模型进行了整体结构优化,基于优化模型设计了4种混合器方案,并耦合3种整流器方案,探究了不同设计方案的压力损失、 NH_3 分布的均匀性及 NO_x 转化效率,对不同混合器和整流器结构方案的可行性进行了综合评价。

1 试验设计

1.1 试验设备

本次试验研究对象为某4缸直列式高压共轨柴油发动机,其排放水平符合国五的标准,主要技术参数如表1所示。

表1 发动机主要技术参数

项目	参数
缸径/mm×行程/mm	95×105
排量/L	2.977
标定功率/kW	110(3 200 r/min)
最大扭矩/(N·m)	400(1 600~2 600 r/min)
最低燃油消耗率/(g·(kW·h) ⁻¹)	<208
排放标准	国五
后处理路线	DOC+CDPF+SCR

台架试验采用DOC+CDPF+SCR的后处理系统,其中SCR载体涂覆的催化剂为钒基催化剂($\text{V}_2\text{O}_5\text{-WO}_3/\text{TiO}_2$),其相关参数如表2所示。

表2 催化器载体主要参数

项目	参数		
	DOC	CDPF	SCR
载体直径/mm	190.5	190.5	190.5
载体长度/mm	101.6	220.0	152.4
孔密度/(个·mm ⁻²)	0.465 (300个/in ²)	0.310 (200个/in ²)	0.465 (300个/in ²)
催化剂	铂钨(5:1)	铂钨(5:1)	$\text{V}_2\text{O}_5\text{-WO}_3/\text{TiO}_2$
涂覆量/(g·L ⁻¹)	1.06	0.35	270.00

1.2 计算模型及边界条件

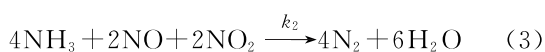
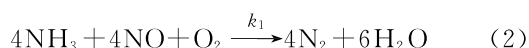
为了方便对SCR催化器中的反应进行分析,将反应分为3个部分,分别为水解反应、SCR选择催化还原反应和 NH_3 的氧化反应^[14]。

水解反应:尿素溶液热解后生成的HNCO(异氰酸)发生水解,生成还原剂 NH_3 ,异氰酸的水解反应受温度影响较小,可以在150℃的低温情况下产生较高的反应速率。反应方程式为:



SCR选择催化还原反应: NH_3 选择性地将 NO_x 还原为 N_2 和 H_2O ,还原反应主要有3个。反应方程

式如下:



氧化反应:为了防止氨气泄露,在 SCR 反应器后端需要加入氧化氨气的反应装置(ASC)。反应方程式为:



图 1 为模拟计算的 SCR 反应区域示意图。当发动机排气温度达到催化剂起活温度时,尿素喷射系统开始工作,将尿素水溶液通过喷射器以雾状的形式进入尾气中。经过喷雾、蒸发热解、混合及水解等过程后生成 NH_3 ,并在催化剂的催化作用下发生催化还原反应和氧化反应,最终将发动机尾气中的 NO_x 还原成为 N_2 和 H_2O 。表 3 所示为仿真边界条件参数。

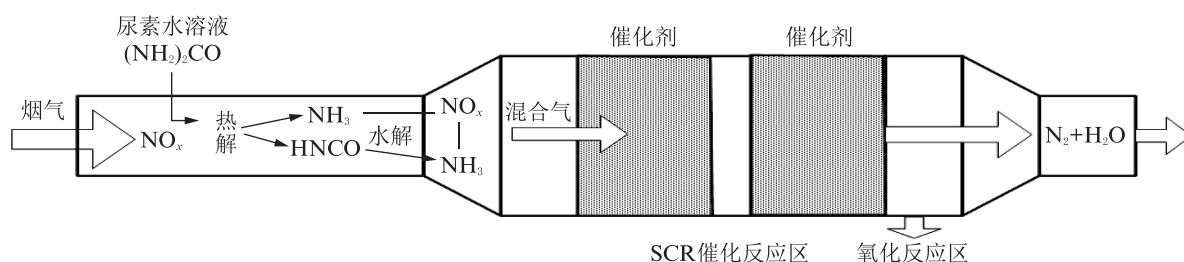


图 1 SCR 反应区域示意图

表 3 仿真边界条件参数

工况	转速/(r·min ⁻¹)	转矩/(N·m)	排气流量/(kg·h ⁻¹)	涡轮增压温度/℃	出口压力/kPa	尿素喷射量/(mL·h ⁻¹)
A	1 200	100	142.7	168	101.6	237
B	1 200	172	156.1	195	101.6	265
C	1 400	200	202.4	260	101.6	368

图 2 所示为 3 个工况下试验值和仿真值 NO_x 转化效率的对比。如图 2 所示,3 个工况下,试验值与仿真值的 NO_x 转化效率趋势基本一致,各工况点误差均小于 5%,说明模型的计算与试验趋势有较强的一致性。

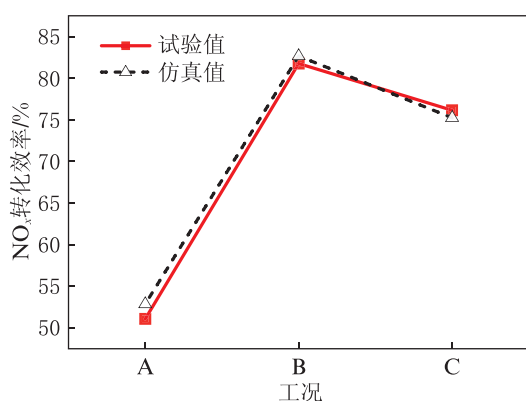


图 2 SCR 试验值与仿真值 NO_x 转化效率对比

模型计算过程中,所有的计算在 1.0 s 内实现了稳定,所以 SCR 模型计算时间统一设定为 1.0 s,三维切片图选择在模型数值稳定点 0.6 s 处。

1.3 模型构建及优化

构建 SCR 三维仿真模型,模型的尺寸参数参考表 2。在模型构建中,考虑到 CFD 模型计算的可行性,将

模型中存在的传感器孔位和细小的载体封装装置进行简化处理,对 CFD 仿真有重要作用的结构进行保留。模型采用国内常规的双载体,其载体长为 152.4 mm,直径为 190.5 mm,壁厚为 0.3 mm,孔密度为 0.465 个/mm² (300 个/in²),两个载体中间存在 8 mm 长的间隙,催化剂涂层厚度为 0.15 mm,孔隙率为 $\epsilon=0.615$ 。排气流经混合器和整流器后进入 SCR 催化器中,与 SCR 载体中的催化剂反应,最后经催化器末端的导流板流出。SCR 几何模型如图 3 所示。

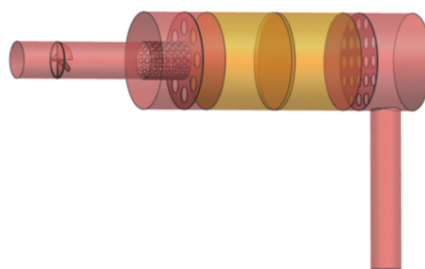


图 3 SCR 几何模型

对原模型进行了整体结构优化,如图 4 所示。设计了前端扩张管和后端收缩管,扩张管和收缩管角度与管径夹角为 35°,排气出口端改为径向出口。

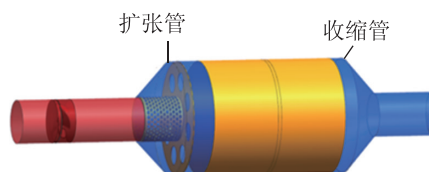


图 4 整体结构优化模型

图 5 和图 6 所示分别为原模型及整体结构优化模

型在3个工况下的速度场云图。如图5及图6所示,2个方案的速度场分布趋势相似,但分布均匀性有所不同。对比2个方案的速度场分布,可以发现原模型混合器的出口区域速度场分布很不均匀,而有扩张管和收缩管的整体结构优化方案综合来说有更好的速度均匀性。

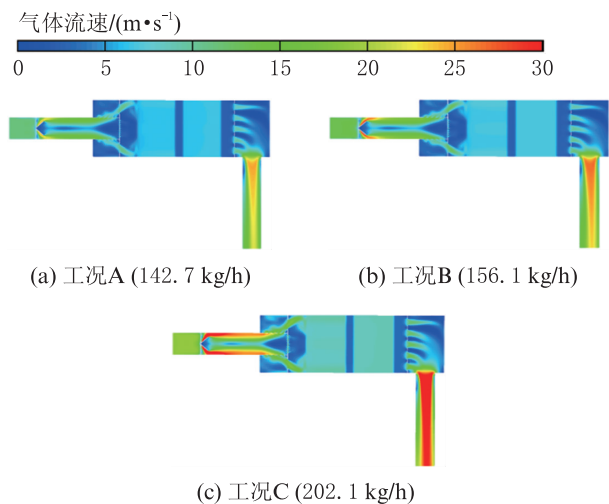


图5 原模型方案速度场对比

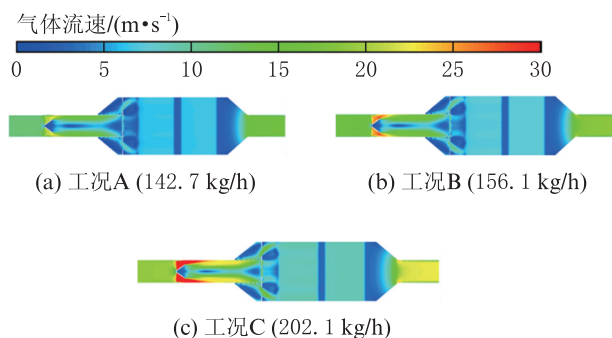


图6 整体结构优化模型的速度场对比

图7为SCR不同整体结构优化方案在A、B、C工况下的 NO_x 转化效率对比。如图7所示,0.3 s后反应趋于稳定,2种方案在各工况下的 NO_x 转化效率差别较小。

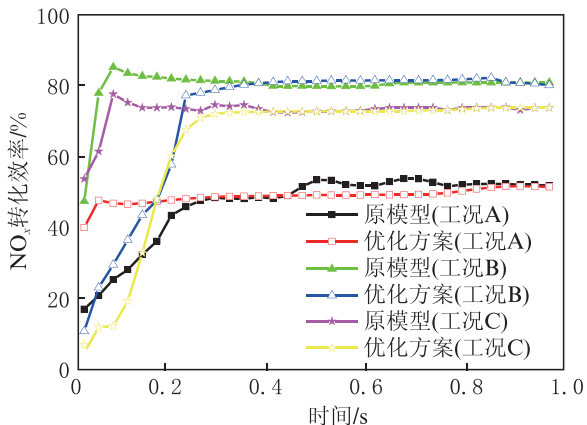


图7 不同整体结构优化方案的 NO_x 转化效率对比

对于模型整体结构优化而言,更好的模型设计为速度均匀性较好的方案^[15]。所以,综合图5和图6的速度场及图7的 NO_x 转化效率对比,后续的仿真计算均基于整体结构优化后的方案。

1.4 方案设计

基于优化后的整体结构模型,参考国内外学者的研究,设计了4种SCR混合器和3种整流器方案,进行对比分析。不同混合器结构如图8所示。方案M1采用螺旋形结构,有7个厚度为2 mm的内窄外宽弧形叶片,其设计特点是为了减小中间位置气流阻力,增加外侧气流旋流,减小混合器前后压力损失,增大尿素与排气流的混合。方案M2采用叶片式结构,有7个厚度为2 mm的叶片,其叶片与径向方向夹角均为 30° ,其设计特点同方案M1一样。方案M3的设计参考了博世公司设计的混合器产品结构,为双排叶片式,其前、后两排叶片之间的相位相差 20° ,每排各有9个叶片,叶片厚度为2 mm,且与径向方向夹角成 30° ,其设计特点是减少混合器前后压差,让颗粒物与叶片产生碰撞,增加尿素颗粒物的破碎和蒸发。方案M4为无混合器方案,与前3种方案形成对比,以更加科学地检验混合器对SCR系统的作用。



图8 不同方案混合器结构

不同整流器结构如图9所示。整流器方案D1外侧沿轴向大孔孔径为32 mm,内侧轴向小孔孔径为4 mm,沿径向小孔孔径为6 mm,整流器厚度为1.5 mm。方案D2在方案D1的基础上,去除外侧挡板并将内侧轴向小孔孔径加大为5.5 mm,其他保持不变。方案D3在方案D1的基础上,将内侧沿轴向小孔孔径加大为12 mm,沿径向小孔孔径加大为10 mm;外侧挡板的大孔改成内外两圈沿轴向结构,孔径为18 mm,厚度为1.5 mm。

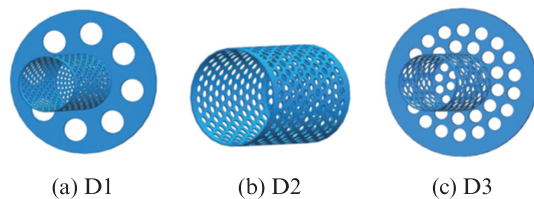


图9 不同方案整流器结构

2 结果及分析

2.1 不同混合器方案仿真分析

2.1.1 不同混合器方案压力损失对比分析

方案 M4 是无混合器的方案,因此压力损失较小,忽略其压力损失,在此不将其与其他方案进行压力损失的对比。图 10 为 SCR 不同混合器方案在 A、B、C 工况下的压力损失对比。

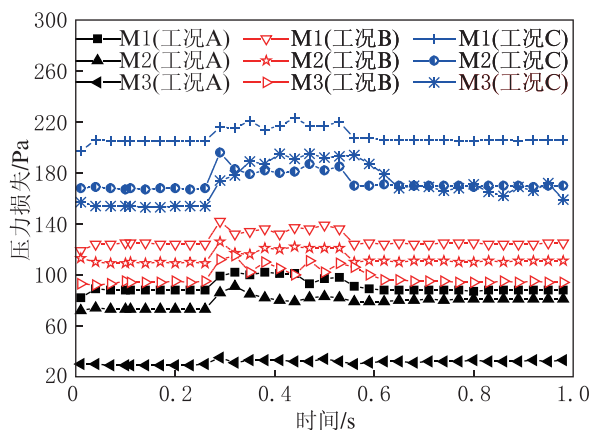


图 10 不同混合器方案压力损失对比

如图 10 所示,随着发动机转速的上升,排气流量的不断增加,不同方案压力损失均增加,各转速下 SCR 的混合器压力损失从大到小排列顺序为方案 M1、方案 M2、方案 M3。在 0.30 s~0.55 s 时,各方案压力损失均有所增大,这是在 0.30 s~0.55 s 时开始喷射尿素,SCR 入口气流流量加大所致。

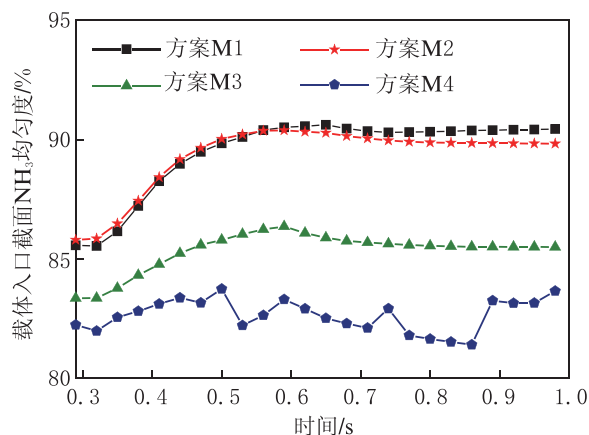
2.1.2 不同混合器方案 NH_3 的分布及对比分析

图 11 为 SCR 不同混合器方案在 A、B、C 工况下的载体入口截面的 NH_3 分布均匀度对比。

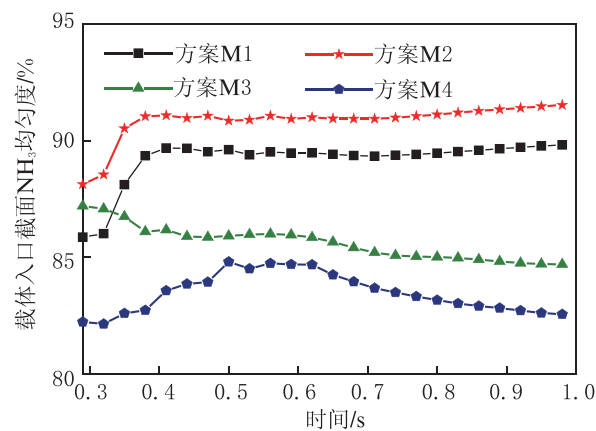
如图 11 所示,在尿素水解后,随着时间推移,载体入口截面 NH_3 的均匀度趋于稳定。4 种混合器设计方案中,在低温工况 A 时,方案 M1 和方案 M2 的载体入口截面 NH_3 分布均匀度基本一致,且明显较好。4 种方案中载体入口截面 NH_3 的分布均匀度最差的是未安装混合器的方案 M4,但方案 M4 在排气流量和尿素喷射量均较高的工况 C 时,载体入口截面 NH_3 均匀度相较于其他方案有较为明显的升高,达到近 87% 左右。其主要原因是在工况 C 时,方案 M4 由于无混合器,气流直接进入整流器内,在载体入口前形成较强烈的气流运动,形成较大的湍动区域,湍流动能总体上升。综合看来,均匀度较好的为方案 M2,3 个工况下均保持在 90% 左右。

2.1.3 不同混合器方案 NO_x 转化效率对比分析

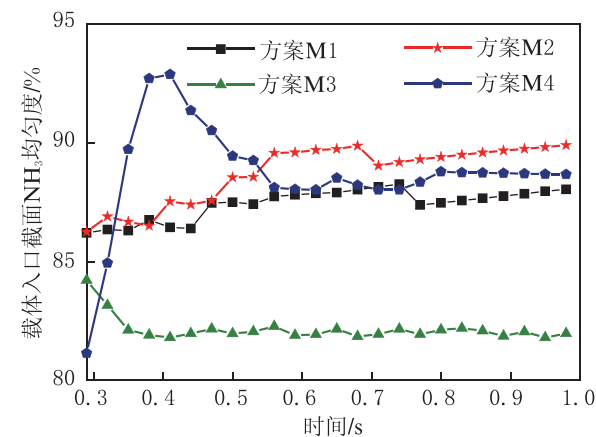
图 12 为 SCR 不同混合器方案在 A、B、C 工况



(a) 工况 A 载体入口截面 NH_3 分布均匀度



(b) 工况 B 载体入口截面 NH_3 分布均匀度

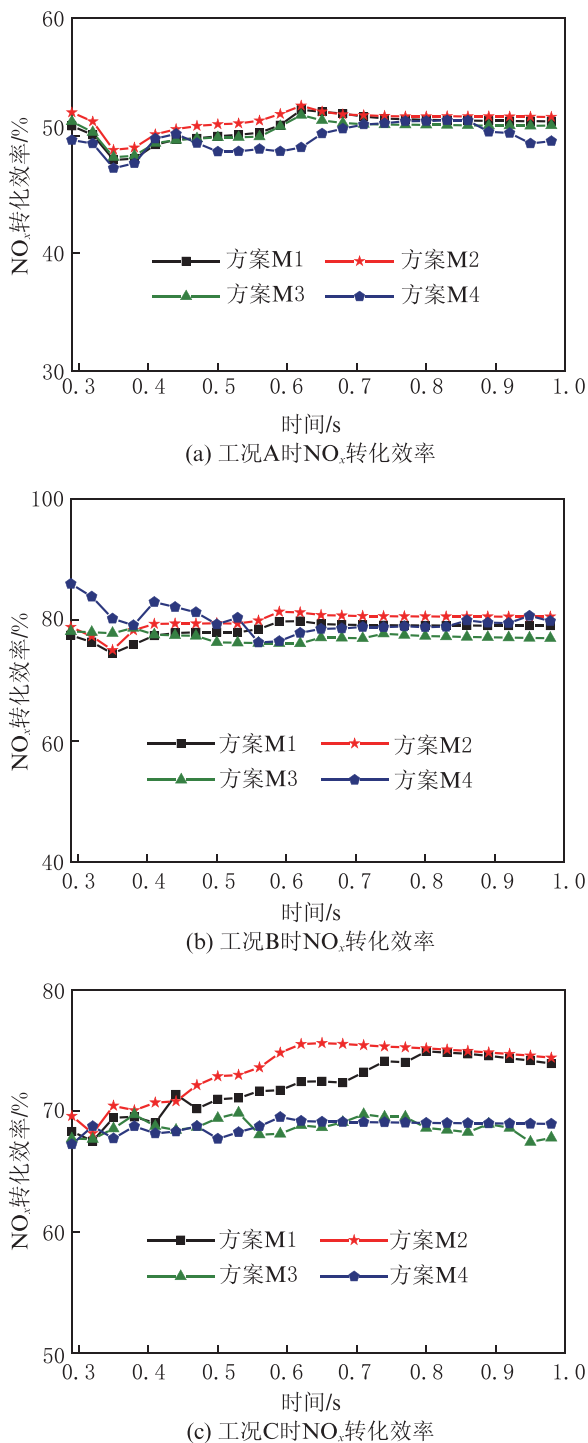


(c) 工况 C 载体入口截面 NH_3 分布均匀度

图 11 不同方案载体入口截面 NH_3 的分布均匀度对比

下 NO_x 转化效率对比。如图 12 所示,在经过约 0.4~0.5 s 的反应后, NO_x 转化效率基本稳定。

如图 12(a) 所示,在排气温度为 168 °C 的低温工况 A 中,4 种混合器方案的 NO_x 转化效率较低,均未超过 54%,说明在低温工况时, NH_3 分布均匀度对 SCR 内反应的影响较小。如图 12(b) 所示,在排气温度为 195 °C 的工况 B 时,由于催化剂反应活性较高,排气中 NO/NO_2 比值接近 1:1,使得反应速

图12 不同混合器方案 NO_x 转化效率对比

率提高, NO_x 转化效率总体较高^[16]。如图 12(c) 所示, 在排气温度为 260 °C 的工况 C 时, 由于排气流量升高, 空速增加, 并且组分中 NO 和 NO₂ 量差异较大, 含硫量较高, 导致虽然温度较高, 但是 SCR 的反应受到一定的抑制, 所以 NO_x 转化效率较低。NH₃ 分布均匀度对 SCR 反应有较大影响, 但不同工况 NH₃ 分布均匀度对 SCR 反应的影响大小存在差异, 在排气温度较低时影响较小, 而在排气温度较高时影响较大。

综上所述, 方案 M2 的 NH₃ 分布均匀度及 NO_x 转化效率均较高, 即方案 M2 的混合器设计较优。

2.2 不同整流器方案对比分析

通过对不同混合器方案进行分析, 为进一步实现 SCR 系统更低的压力损失、更高的 NH₃ 分布均匀度及 NO_x 转化效率、减少尿素结晶的可能性等目标, 选取较优的混合器方案 M2, 结合 3 种整流器方案进行对比分析。

2.2.1 不同整流器方案速度场对比分析

图 13~图 15 为 SCR 不同整流器方案, 在 A、B、C 工况下整流器区域局部速度场对比。对比图 13~图 15 可以发现, 随着发动机转速上升, 排气流量加大, 各方案 SCR 入口前端的速度场呈现出相同的增加趋势。但不同的方案, 根据整流器挡板上孔径大小及孔的分布情况, 气流速度呈现出不同的分布。

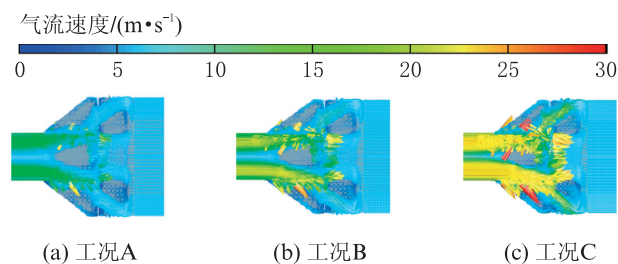


图13 方案 D1 整流器局部区域速度场

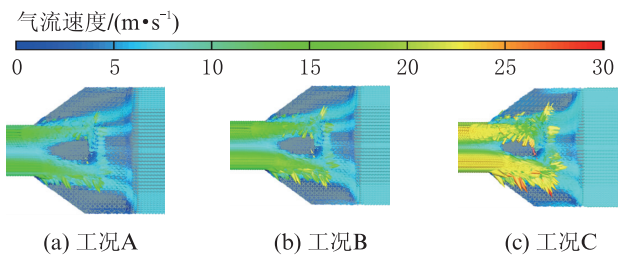


图14 方案 D2 整流器局部区域速度场

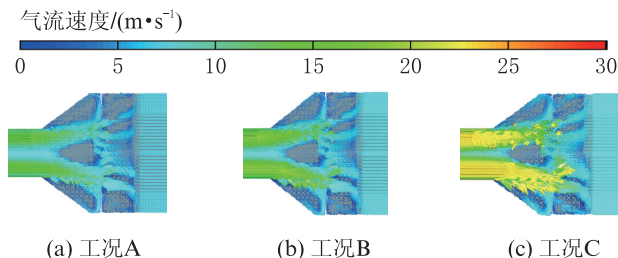
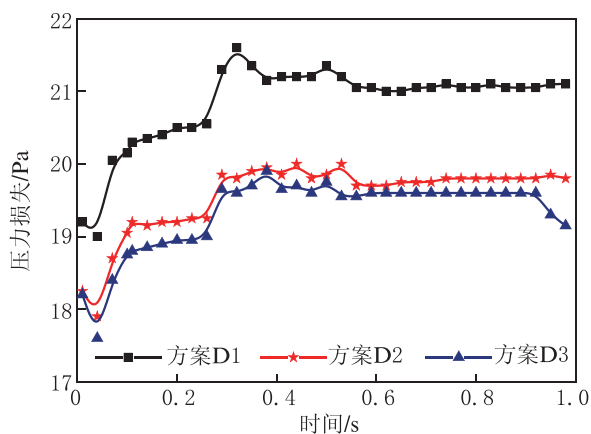


图15 方案 D3 整流器局部区域速度场

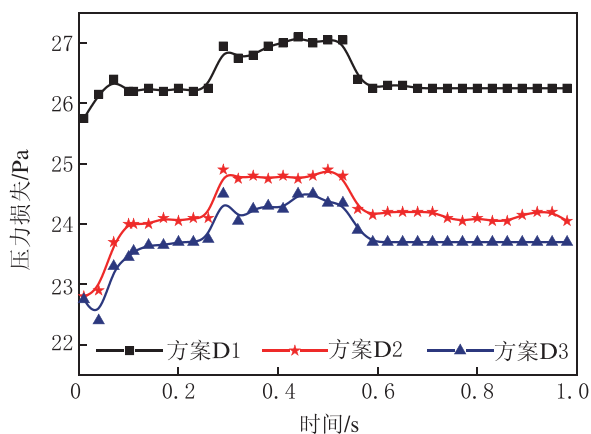
2.2.2 不同整流器方案压力损失对比分析

图 16 为 SCR 不同整流器方案, 在 A、B、C 工况下的压力损失对比。如图 16 所示, 在不同工况下随着排气流量的增大, 整流器前后压力损失不断增大。

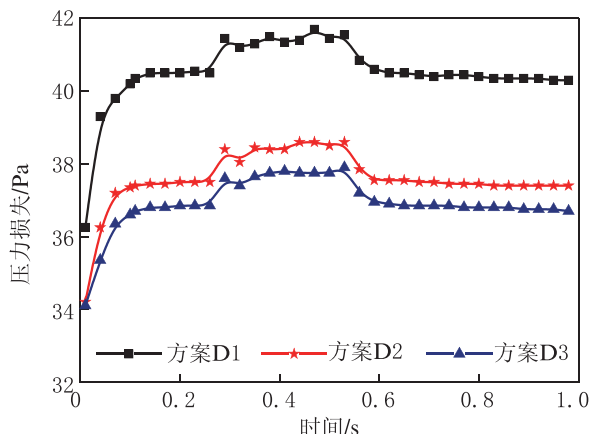
对比不同方案,压力损失从大到小的排列顺序为方案 D1、方案 D2、方案 D3,这主要是由整流器孔道大小的设计决定的。但总的来说,整流器前后的压力损失相比整个系统的压力损失是较小的,对于整个系统而言,整流器的压力损失可以忽略。



(a) 工况A压力损失



(b) 工况B压力损失



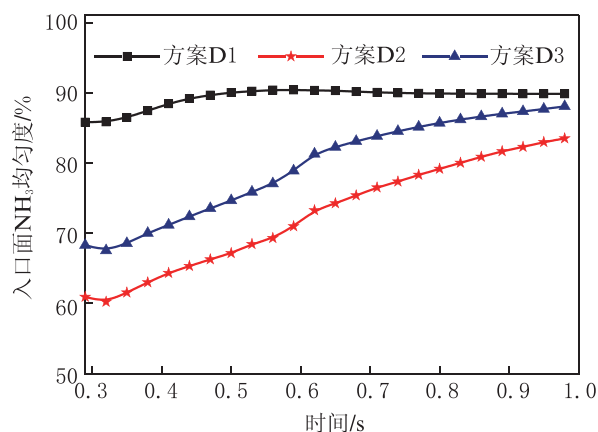
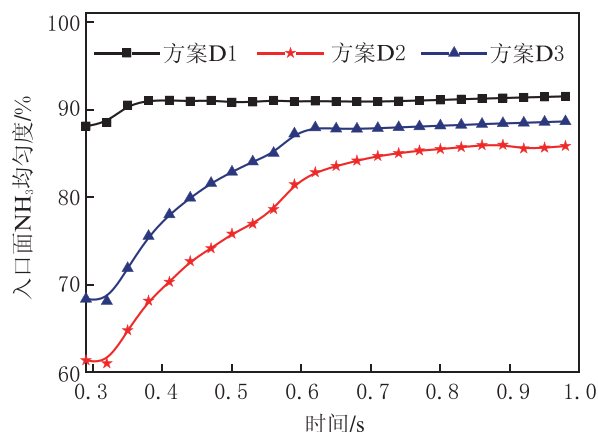
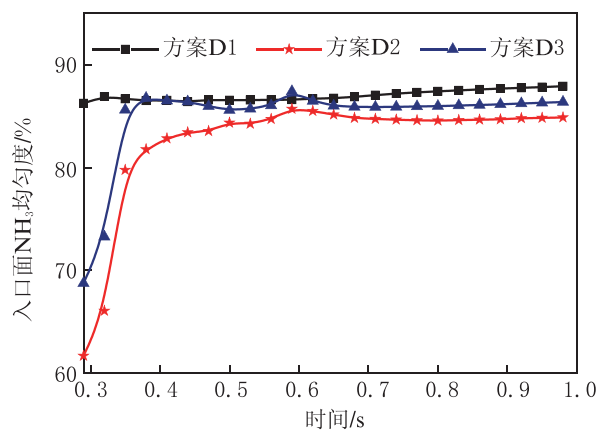
(c) 工况C压力损失

图 16 不同整流器方案压力损失对比

2.2.3 不同整流器方案载体入口截面 NH_3 分布均匀性

如图 17 所示,载体入口截面 NH_3 分布均匀性对比中,由于喷射的尿素经过热解、水解,需要一定稳定时间,所以计算时间在 0.4 s 后。3 种方案在各自

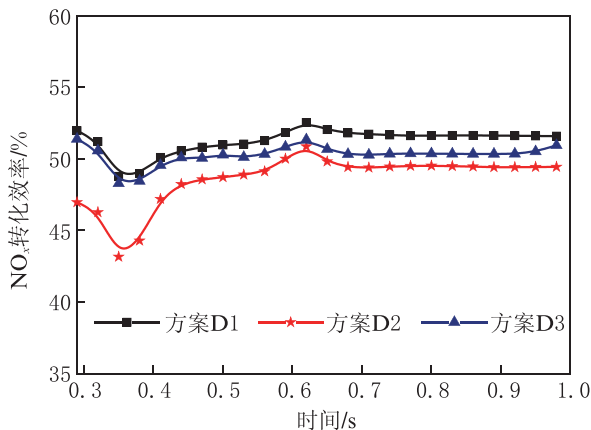
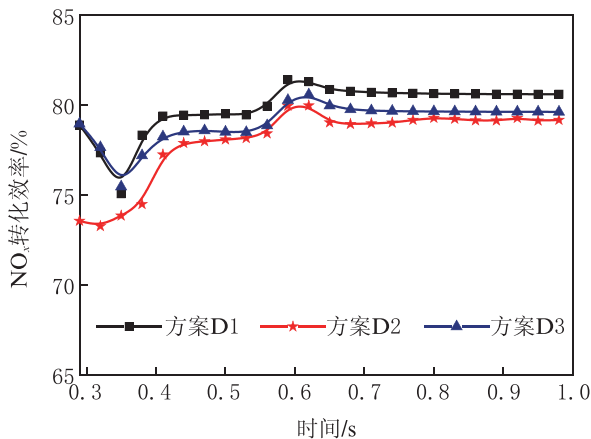
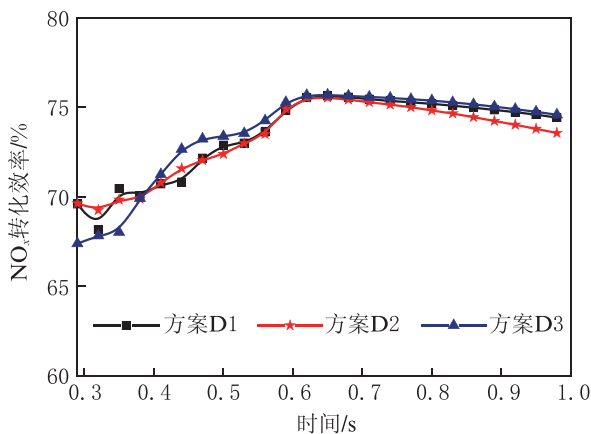
工况下,载体入口截面 NH_3 分布均匀度由好到差的排列顺序为方案 D1、方案 D3、方案 D2。方案 D2 因为没有外侧挡板,气流主要集中于中心区域, NH_3 分布均匀性最差。其他 2 个方案中整流器的轴向大孔对气流有扩张作用,使未分解的尿素颗粒相互碰撞、蒸发和热解,在载体入口区域产生较大的湍流动能,促进 NH_3 的生成,并提高 NH_3 分布均匀度。

(a) 工况A载体入口截面时 NH_3 分布均匀度(b) 工况B载体入口截面时 NH_3 分布均匀度(c) 工况C载体入口截面时 NH_3 分布均匀度图 17 不同整流器方案载体入口截面 NH_3 均匀度对比

2.2.4 不同整流器方案 NO_x 转化效率对比

如图 18 所示,在不同工况下方案 D1 的 NO_x 转

化效率均高于其他方案。原因是其催化器内保持有较高的 NH_3 分布均匀度,使 SCR 反应较好。综上所述,在扩张管的作用下,方案 D1 的 SCR 载体入口区域中湍流动能较强,且载体入口截面 NH_3 的分布均匀度较高,使 SCR 催化器内 NH_3 的整体分布均匀性较高,因此方案 D1 明显改善了 NH_3 在载体中的分布,增大了催化剂和氮氧化物的接触面积,提高了反应中 NO_x 的转化效率,同时也降低了尿素在催化器壁面区域结晶的可能性。

(a) 工况A时 NO_x 转化效率(b) 工况B时 NO_x 转化效率(c) 工况C时 NO_x 转化效率图 18 不同整流器方案 NO_x 转化效率对比

3 结论

(1) 对 SCR 模型进行整体结构优化,设计了前端扩张管和后端收缩管,使 SCR 内部速度场较均匀,且由于扩张管作用,使载体入口截面 NH_3 分布均匀性较好。

(2) 混合器采用内窄叶片结构的方案 M2,有着较低的压力损失及较高的 NH_3 分布均匀度和 NO_x 转化效率,SCR 系统性能较优。

(3) 由于扩张管的作用,入口气流主要沿壁面运动,在中间区域形成较大的涡流。整流器挡板仅有一圈大孔的方案 D1 明显改善了 NH_3 在载体中的分布,增大了催化剂和氮氧化物的接触面积,提高了反应中 NO_x 的转化效率,因此其 SCR 系统性能较优。

参考文献:

- [1] 周东升. 新型 SCR 纳米催化剂的制备及其脱硝中的应用[D]. 杭州:浙江大学,2015.
ZHOU D S. Preparation and pilot application of novel SCR nano-catalysts[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2015.
- [2] YIM S D, KIM S J, BAIK J H, et al. Decomposition of urea into NH_3 for the SCR process[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2004, 43(16): 4856-4863.
- [3] KEUPER A, UNGER H M I, HUANG J, et al. Investigations to achieve highest efficiencies in exhaust gas after-treatment for commercial vehicles using an SCR system[J]. SAE International Journal of Commercial Vehicles, 2011, 4: 145-154.
- [4] 谭理刚, 冯鹏飞, 杨树宝, 等. 基于 CFD 的 Urea-SCR 混合器性能研究[J]. 内燃机工程, 2018, 39(4): 61-66.
TAN L G, FENG P F, YANG S B, et al. Study on static mixer performance in urea-SCR systems based on CFD code[J]. Chinese Internal Combustion Engine Engineering, 2018, 39(4): 61-66.
- [5] 苏庆运, 冯廷智, 郑贯宇, 等. 柴油机 SCR 催化转化器的数值模拟[J]. 内燃机学报, 2017, 35(1): 53-59.
SU Q Y, FENG T Z, ZHENG G Y, et al. Numerical simulation of diesel SCR system[J]. Transactions of CSICE, 2017, 35(1): 53-59.
- [6] TAN L G, FENG P F, YANG S B, 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.
- [7] 臧志成, 魏家星, 卢凯, 等. 喷嘴集成式 SCR 混合器设计与数值模拟研究[J]. 内燃机工程, 2017, 38(4): 103-108.
ZANG Z C, WEI J X, LU K, et al. Design of and numerical simulation study on injector integrated SCR mixer[J]. Chinese Internal Combustion Engine Engineering, 2017, 38(4): 103-108.

(下转第 61 页)