

На правах рукописи

УДК 621.436

Блинов Артем Сергеевич

**РАЗРАБОТКА СРЕДСТВ МОДЕЛИРОВАНИЯ СИСТЕМЫ  
НЕЙТРАЛИЗАЦИИ ОТРАБОТАВШИХ ГАЗОВ  
ТРАНСПОРТНОГО ДИЗЕЛЬНОГО ДВИГАТЕЛЯ**

Специальность 2.4.7 Турбомашины и поршневые двигатели

**АВТОРЕФЕРАТ**  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата технических наук



Москва - 2023

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель: **Маластовский Николай Сергеевич**  
кандидат технических наук, доцент кафедры  
«Комбинированные двигатели и альтернативные  
энергоустановки» ФГБОУ ВО МГТУ  
им. Н.Э. Баумана

Официальные оппоненты: **Сайкин Андрей Михайлович**  
доктор технических наук, старший научный со-  
трудник, главный специалист Государственного  
научного центра Российской Федерации ФГУП  
«НАМИ»

**Зеленцов Андрей Александрович**  
кандидат технических наук, научный сотрудник  
ФАУ «ЦИАМ им. П. И. Баранова»

Ведущая организация: ФГБОУ ВО «Вятский государственный  
агротехнологический университет»

Защита диссертации состоится «05» марта 2024 г. в 14.00 часов на заседа-  
нии диссертационного совета 24.2.331.17 при Московском государственном  
техническом университете им. Н.Э. Баумана по адресу: 105005, г. Москва, Руб-  
цовская наб., д. 2/18, Учебно-лабораторный корпус, ауд. 947.

С диссертацией можно ознакомиться в научно-технической библиотеке  
Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана  
или на сайте [www.bmstu.ru](http://www.bmstu.ru)

Отзывы на автореферат в двух экземплярах с подписью, заверенные печат-  
тью, просим направлять в адрес ученого секретаря совета.

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 г.

Ученый секретарь диссертационного  
совета, к.т.н.



Харитонов С.В.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность диссертационной работы** обусловлена необходимостью выполнения современных и перспективных требований к показателям токсичности поршневых двигателей транспортного назначения. На сегодняшний день эти показатели в значительной степени достигаются за счет применения различных систем нейтрализации отработавших газов (ОГ). В вопросе снижения уровня выбросов оксидов азота ( $\text{NO}_x$ ) транспортными дизелями большую роль играют системы селективного каталитического восстановления (SCR). В процессе их проектирования активно применяются методы математического моделирования, разработка и совершенствование которых в условиях повышения требований к эффективности систем SCR представляет актуальную задачу, имеющую значительную практическую ценность.

**Целью работы** является совершенствование методов моделирования систем селективного каталитического восстановления оксидов азота транспортных дизелей.

Для достижения поставленной цели предусматривается решение следующих **основных задач**:

1. Анализ физико-химических процессов, протекающих в системах SCR, и существующих подходов их численного моделирования для оценки их возможностей и ограничений, применяемых математических моделей;
2. Разработка методики и средств моделирования систем SCR с применением математических моделей различного уровня сложности для снижения ресурсоемкости вычислений при сохранении высокой детализации описываемых процессов;
3. Валидация разработанных математических моделей системы SCR по известным экспериментальным данным;
4. Проверка возможностей разработанной методики и средств моделирования в ходе проведения численных расчетов опытной системы SCR транспортного дизеля 6ЧН13/14 (ЯМЗ 6566).

### **Методы исследований:**

- сбор и критический анализ полученных ранее результатов по исследуемой проблеме, представленных в литературных источниках;
- численное моделирование течения ОГ в системе SCR, распыливания водного раствора мочевины в поток ОГ и его испарения и разложения, химических реакций восстановления оксидов азота в блоке катализатора;
- сопоставление полученных результатов численного моделирования с известными опубликованными экспериментальными данными.

### **Научная новизна** исследования состоит в:

- методике сквозного расчета системы SCR транспортного дизеля, основанной на применении собственной математической модели блока катализатора и коммерческого CFD-комплекса ANSYS FLUENT;
- математическом описании нестационарного теплового состояния монолитных каталитических блоков со сквозными каналами;

- математической модели для расчета физико-химических процессов, протекающих в монолитных каталитических блоках SCR, учитывающей неравномерность распределения параметров ОГ на их входе и теплообмен между каналами;

**Практическая значимость работы** состоит в:

- методике расчета, которая может быть использована при проектировании и доводке систем SCR;
- реализованной в виде программного кода математической модели каталитического блока SCR, позволяющей обоснованно подходить к выбору его габаритных размеров и основных характеристик для обеспечения требуемой эффективности очистки ОГ на этапе проектирования систем SCR;
- рекомендациях к опытной конструкции системы SCR транспортного дизеля 6ЧН13/14 (ЯМЗ 6566), способных обеспечить эффективность очистки ОГ от оксидов азота до уровня экологического стандарта Евро-5.

Результаты диссертационной работы внедрены в ГНЦ РФ ФГУП «Научно-исследовательский автомобильный институт» (ГНЦ РФ ФГУП «НАМИ»), а также используются в учебном процессе кафедры «Комбинированные двигатели и альтернативные энергоустановки» МГТУ им. Н.Э. Баумана в курсе «Практика по получению первичных навыков работы с программным обеспечением применительно к области (сфере) профессиональной деятельности».

**Положениями, выносимыми на защиту**, являются:

- процедура согласования и передачи данных между ПК ANSYS FLUENT и разработанной программой каталитического блока, позволяющая использовать результаты CFD моделирования гидролизного участка системы SCR в качестве входных граничных условий по каналам блока катализатора при проведении расчетов восстановления оксидов азота;
- способ пространственной дискретизации стенок каталитического блока на контрольные объемы с учетом особенностей его геометрии, позволяющий сократить количество решаемых уравнений при проведении численных расчетов теплового состояния катализатора;
- средства моделирования системы SCR, позволяющие проводить расчетные исследования и оптимизацию протекающих процессов во всей конструкции и обоснованно подходить к выбору ее параметров.

**Достоверность и обоснованность научных результатов** обусловлены применением фундаментальных законов гидродинамики, тепломассообмена и химической кинетики при составлении уравнений разрабатываемых математических моделей и определении граничных условий; использованием широко апробированных программных продуктов при реализации разработанных математических моделей и проведении расчетных исследований; согласованием результатов расчетных исследований с экспериментальными данными, полученными на модельных установках другими учеными и опубликованными в рецензируемых научных изданиях.

**Апробация работы.** Основные положения диссертации докладывались на МНТК «Двигатель-2017», МГТУ им. Н.Э. Баумана (г. Москва, 31 января - 1 февраля 2017 г.); XXI Школы-семинара молодых ученых и специали-

стов «Проблемы газодинамики и тепломассообмена в энергетических установках», СПбПУ (г. Санкт-Петербург, 22-26 мая 2017 г.); Седьмой Российской национальной конференции по теплообмену, НИУ «МЭИ» (г. Москва, 22-26 октября 2018 г.); МНТК «Двигатель-2018», посвященной 150-летию факультета «Энергомашиностроение» МГТУ им. Н.Э. Баумана (г. Москва, 30-31 октября 2018 г.); МНТК «Пром-Инжиниринг» (г. Сочи, 25-29 марта 2019 г.); Двенадцатой Всероссийской конференции молодых ученых и специалистов «Будущее машиностроения России», МГТУ им. Н.Э. Баумана (г. Москва, 24-27 сентября 2019 г.); МНК по энергетике, экологии и строительству (ЕЕСЕ – 2019), СПбПУ (г. Санкт-Петербург, 19-20 ноября 2019 г.); МНТК «9-е Лукашинские чтения. Проблемы и перспективы развития автотранспортного комплекса» (Москва, МАДИ (ГТУ), 2021 г.); Четырнадцатой Всероссийской конференции молодых ученых и специалистов «Будущее машиностроения России», МГТУ им. Н.Э. Баумана (г. Москва, 21-24 сентября 2021 г.)

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 16 научных работ, из них 4 в изданиях по списку ВАК РФ, и 5 в изданиях, рецензируемых международными системами цитирования Web of Science и/или Scopus; получено 2 свидетельства о регистрации программ для ЭВМ.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, основных выводов и заключения, списка использованной литературы и приложения. Общий объем работы 155 страниц, включая 128 страниц основного текста, содержащего 65 рисунков и 23 таблицы. Список литературы включает 251 наименование на 25 страницах. Приложение включает акт о внедрении результатов диссертационной работы.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обоснован выбор темы, сформулированы цель и задачи работы, изложены методы исследования, приведены выносимые на защиту научные положения.

**В первой главе** выполнен аналитический обзор методов снижения вредных выбросов с ОГ транспортных дизелей, показана актуальность применения систем нейтрализации, в частности систем селективного каталитического восстановления оксидов азота, обсуждены современные подходы к их проектированию, особое внимание уделено вопросу использования математического моделирования.

Отмечен вклад в изучение рассматриваемых вопросов таких ученых как: Корнилов Г.С., Надарейшвили Г.Г., Панчишный В.И., Johnson T. V., Koltsakis G.C., Pontiakakis G.N., Wurzenberg J.C. и др.

Из анализа результатов работ, посвященных исследуемой проблематике, следует, что основную трудность сквозного моделирования систем SCR представляет необходимость описания процессов с существенным отличием характерных масштабов времени протекания и размерности, что влечет за собой потребность в допущениях или в значительных вычислительных ресурсах. Нахождение компромисса в решении данной проблемы путем создания ком-

бинированной методики расчета и соответствующих ей средств моделирования, основанных на применении математических моделей различного уровня сложности, составило вышеприведенные цель и задачи исследования.

**В второй главе** диссертации представлено описание разработанной методики расчета систем SCR, обоснование ее базовых принципов, применяемых программных продуктов и математических моделей.

Общие положения методики схематично отображены на Рисунке 1. Она основана на так называемом комбинированном подходе, в рамках которого процесс моделирования разделен на два последовательных этапа:

- трехмерное моделирование процессов, протекающих на гидролизном участке системы, в ANSYS FLUENT;
- моделирование физико-химических процессов в каталитическом блоке с использованием разработанной 1D/2D модели, реализованной в виде программного кода в среде OCTAVE.

Идея такого разделения обусловлена существенным отличием динамики и размерности процессов, характерных для данных участков систем SCR, при описании которых применение математических моделей различного уровня сложности позволяет снизить ресурсоемкость процесса моделирования и сохранить приемлемый для практики уровень детализации и точности результатов.



Рисунок 1. Схематичное представление методики расчета системы SCR

В рамках первого этапа в программном комплексе ANSYS FLUENT осуществляется математическое описание газовой динамики, впрыскивания и испарения реагента, протекания химических реакций разложения мочевины на гидролизном участке системы SCR. Целью проведения расчетных исследований является получение информации о распределении параметров потока газа на входе в блок катализатора: температуры, скорости, плотности, химического состава.

На втором этапе выполняется расчет физико-химических процессов в каталитическом блоке SCR с использованием разработанной в среде OCTAVE программы, куда импортируются полученные ранее результаты CFD моделирования для учета неравномерности распределения параметров потока ОГ по каналам. Граничные условия (ГУ) на входе по каждому из них определяются путем интерполяции и последующего осреднения CFD данных на узлах генерируемой в программе сеточной модели, описывающей геометрию поперечного сечения блока. В качестве результатов моделирования могут быть получены:

- профили распределения концентраций химических компонентов газа ( $\text{NO}_x$ ,  $\text{NH}_3$  и др.) в продольном и поперечном сечениях блока, позволяющие судить об эффективности очистки отработавших газов;

- данные об изменении теплового состояния блока катализатора, которые могут быть использованы для оценки оптимальности условий протекания гетерогенных химических реакций, длительности достижения катализатором рабочего диапазона температур при холодном пуске двигателя.

Процесс моделирования в ANSYS FLUENT осуществляется с использованием встроенных математических моделей. Их набор и основные настройки определены по результатам аналитического обзора литературы и проведения расчетных исследований.

Для математического описания течения ОГ в системе SCR, используются осредненные по Рейнольдсу уравнения, выражающие основные законы сохранения: уравнение неразрывности, количества движения Навье-Стокса, энергии и диффузии, замыкаемые Realizable k- $\epsilon$  моделью турбулентности. Влиянием твердой фазы пренебрегается, а поток моделируется как сплошная среда (в Эйлеровых координатах) с дисперсными частицами водного раствора мочевины (в Лагранжевых координатах). При этом учитывается взаимное влияние одной фазы на другую посредством обмена импульсом, массой и энергией.

Моделирование течения в пристеночном слое осуществляется с помощью гибридной модели Enhanced Wall Treatment, в рамках которой зона влияния вязкости, в зависимости от качества разрешения сетки, описывается посредством низкорейнольдсовых моделей или пристеночных функций специального вида.

Блок катализатора при проведении CFD расчетов заменяется фиктивной пористой средой (Porous Media Model) с заданными характеристиками, обеспечивающими соблюдение подобия следующих факторов: пористость, проницаемость (направление течения), режим течения и газодинамическое сопротивление, определяемое по экспериментальным данным. Это позволяет избежать точного геометрического описания многочисленных каналов катализатора и связанного с этим значительного усложнения и ресурсоемкости расчетов.

Впрыскивание водного раствора мочевины в поток ОГ описывается в рамках модели Discrete Phase Model (DPM). Данные первичного распада струи (форма, размер и скорость начальных капель) задаются непосредственно в качестве граничных условий. Развитие струи и траектория капель определяются в Лагранжевых координатах в результате интегрирования уравнений динамического баланса. Отклонение траекторий капель из-за турбулентных флуктуаций в сплошной фазе учитывается при помощи модели Discrete Random Walk Model, построенной на вероятностных методах. Для моделирования вторичного распада капель используется модель Taylor Analogy Breakup, которая хорошо согласуется с экспериментами при впрыске с невысоким числом Вебера ( $We < 100$ ), характерного при впрыске мочевины. Изменение величины коэффициента аэродинамического сопротивления капель, вследствие изменения их формы в процессе движения, учитывается посредством Dynamic Drag Model.

Испарение капель водного раствора мочевины, как многокомпонентной жидкости, рассчитывается с помощью модели Multicomponent Particle Definition. Процесс тепло- и массообмена на границе раздела фаз происходит по конвективно-диффузионному механизму с учетом влияния Стефанова потока. Теплофизические свойства жидкости, а также массовая доля испарившихся компонентов вблизи поверхности капли рассчитываются с использованием правила 1/3. Подвод теплоты к поверхности капли осуществляется посредством конвективного теплообмена, пренебрегая радиационной составляющей. На протяжении всего процесса испарения капли предполагается сохранение в пределах нее равномерного распределения температур и концентраций компонентов.

При описании термического разложения мочевины используется общепринятое допущение об одностадийности протекания реакций термоллиза мочевины и гидролиза изоциановой кислоты, пренебрегая образованием промежуточных побочных продуктов. Скорости химических реакций вычисляются в соответствии с законом действующих масс. Кинетические параметры в уравнениях Аррениуса при расчете констант скоростей реакций, а также тепловой эффект реакций берутся из достоверных литературных источников.

Расчет физико-химических процессов в каталитическом блоке осуществляется с использованием разработанной математической модели, реализованной в виде программного кода. Блок катализатора представляется набором сквозных каналов, для каждого из которых моделирование выполняется параллельно. Исключение составляет описание теплового состояния стенок каналов, в рамках которого рассматривается теплообмен во всей конструкции катализатора целиком. Это позволяет объединить расчет каталитического блока в единую задачу и учесть взаимное влияние протекающих в каналах процессов друг на друга.

В пределах одного канала (Рисунок 2) используется одномерная математическая модель, которая описывает следующие явления: движение газа в осевом направлении; адсорбцию/десорбцию химических компонентов на поверхности катализатора; химическое преобразование реагентов в каталитических центрах; теплообмен между газом и стенками канала.

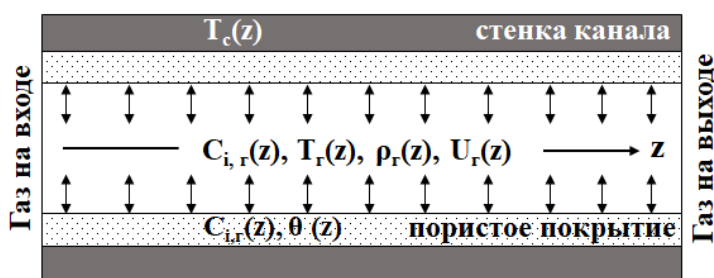


Рисунок 2. Схематичное изображение канала каталитического блока

При разработке модели были исследованы и приняты допущения, обеспечившие снижение ее ресурсоемкости: предполагается ламинарный режим течения газа в каналах, принимая во внимание их характерные размеры и соответствующие числа Рейнольдса; потери давления по длине канала не моделируются, учитывается общее газодинамическое сопротивление блока при проведении CFD расчетов (Porous Media Model); применяется модель идеального газа; диффузионные процессы в газовой фазе в осевом направлении не



рассматриваются, считая их несущественными по сравнению с конвективным теплопереносом; концентрации компонентов в основном потоке газа и в пристеночном пористом слое (Рисунок 2) принимаются равными, учитывая, что скорость диффузии много превышает скорость протекания химических реакций; переходными членами в газовой фазе пренебрегается, считая их несущественными по сравнению с конвективными составляющими; описываются только доминантные гетерогенные каталитические реакции, протекающие по механизму Или-Ридила (1-4); теплопроводность в стенках каталитического блока в осевом направлении и тепловой эффект химических реакций не учитываются, полагая, что они незначительны относительно конвективного теплопереноса.

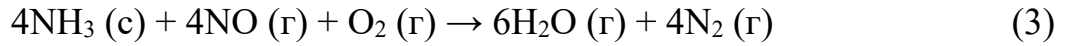
Адсорбция аммиака:



Десорбция аммиака:



Восстановление монооксида азота:



Окисление аммиака:



где (г) – означает, что молекула расположена в газовом потоке, (с) – адсорбирована на поверхности.

Принимая во внимание вышеперечисленные допущения, система уравнений для описания процесса нейтрализации оксидов азота в канале каталитического блока SCR имеет следующий вид:

$$\frac{\partial(\rho_{\text{г}}u)}{\partial z} = 0 \quad (5)$$

$$\rho_{\text{г}}A_{\text{г}}C_{p,\text{г}}u \frac{\partial T_{\text{г}}}{\partial z} = -\alpha P(T_{\text{г}} - T_{\text{кан.}}) \quad (6)$$

$$\rho_{\text{с}}C_{p,\text{с}} \frac{\partial T_{\text{с}}}{\partial t} = \lambda_{\text{с}} \left( \frac{\partial^2 T_{\text{с}}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_{\text{с}}}{\partial y^2} \right) \quad (7)$$

$$\frac{\partial C_{\text{NH}_3}}{\partial z} = \frac{s}{A_{\text{г}}u} \left( -k_{\text{адс}}C_{\text{NH}_3}(1 - \theta) + k_{\text{дес}} \exp\left(-\frac{E_{a,\text{дес}}(1 - \beta\theta)}{RT_{\text{с}}}\right)\theta \right) \quad (8)$$

$$\frac{\partial C_{\text{NO}}}{\partial z} = \frac{s}{A_{\text{г}}u} \left( -k_{\text{вос}} \exp\left(-\frac{E_{a,\text{вос}}}{RT_{\text{с}}}\right)C_{\text{NO}}\theta \right) \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial t} = & \left( k_{\text{адс}}C_{\text{NH}_3}(1 - \theta) - k_{\text{дес}} \exp\left(-\frac{E_{a,\text{дес}}(1 - \beta\theta)}{RT_{\text{с}}}\right)\theta \right. \\ & \left. - k_{\text{вос}} \exp\left(-\frac{E_{a,\text{вос}}}{RT_{\text{с}}}\right)C_{\text{NO}}\theta - k_{\text{окис}} \exp\left(-\frac{E_{a,\text{окис}}}{RT_{\text{с}}}\right)\theta \right) \quad (10) \end{aligned}$$

где  $\rho_{\text{г}}, \rho_{\text{с}}$  – плотность газа, стенок;  $A_{\text{г}}$  – площадь проходного сечения канала;  $C_{p,\text{г}}, C_{p,\text{с}}$  – удельная теплоемкость газа, стенок;  $T_{\text{г}}$  – температура газа в канале,  $T_{\text{кан.}}$  – осредненная температура стенок канала на участке  $\delta z$ ;  $T_{\text{с}}$  – локальная температура стенки канала;  $u$  – скорость газового потока в канале;  $\lambda_{\text{с}}$  – коэффициент теплопроводности стенок канала;  $\alpha$  – коэффициент теплоотдачи между газом и стенками канала;  $P$  – периметр поперечного сечения канала;  $z$  – координата в осевом направлении канала;  $C_i$  – концентрация химического

компонента  $i$  в потоке газа;  $k_i$  – предэкспоненциальные множители;  $E_{a,i}$  – энергии активации;  $\theta = C_{NH_3}(c)/\Omega$  – загрузка каталитической поверхности адсорбированным  $NH_3$ ;  $C_{NH_3}(c)$  – концентрация  $NH_3$ , адсорбированного на поверхности катализатора;  $\Omega$  – число каталитических центров в единице объема пористого покрытия в канале;  $\beta$  – параметр покрытия поверхности;  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $s = \Omega/L$  – число каталитических центров на единицу длины канала. Параметры  $k_i$ ,  $E_{a,i}$ ,  $\beta$ ,  $s$ ,  $\Omega$  индивидуальны для конкретного исполнения каталитического блока.

Коэффициент теплоотдачи между газом и стенками канала определяется по полуэмпирической формуле (11), влиянием начальных участков гидродинамической и тепловой стабилизации пренебрегается.

$$\alpha = 2.976 \cdot \frac{\lambda_\Gamma}{d_\Gamma} \left( 1 + 0.095 \frac{Re \cdot Pr \cdot d_\Gamma}{z} \right)^{0.45} \quad (11)$$

где  $\lambda_\Gamma$  – коэффициент теплопроводности газа;  $d_\Gamma$  – гидравлический диаметр канала;  $Re, Pr$  – число Рейнольдса и число Прандтля, соответственно.

Выражение (7) представляет собой уравнение теплового баланса, записанное для поперечного сечения блока катализатора толщиной  $\Delta z$ . Пространственная дискретизация уравнения (7) осуществляется методом контрольных объемов (12), расчетная область при этом делится на макроэлементы в соответствии с Рисунком 3. Предлагаемый способ позволяет сократить число разбиений, т.е. число решаемых в последующем алгебраических уравнений.

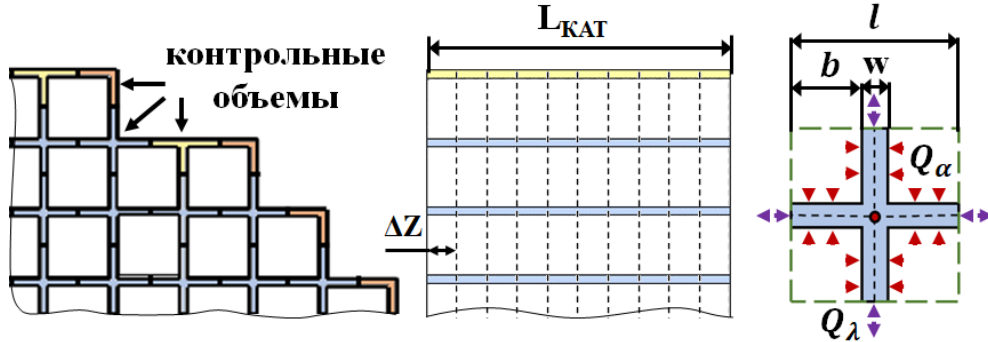


Рисунок 3. Пространственная дискретизация модели каталитического блока

$$\begin{aligned} \rho_c C_{p,c} V_i \frac{\partial \bar{T}_i}{\partial t} &= \sum_{f=1}^{N_f} \lambda_c \text{grad}(\bar{T}_i)_f \cdot n_f \cdot S_f + \sum_{g=1}^{N_g} K_g (T_g - \bar{T}_i) S_g \\ &= \sum_{f=1}^{N_f} (\delta Q_\lambda)_f + \sum_{g=1}^{N_g} (\delta Q_\alpha)_g \end{aligned} \quad (12)$$

где  $\bar{T}_i$  – среднее по  $i$ -му контрольному объему значение температуры;  $f$  – граница между контрольными объемами;  $S_f$  – площадь границы  $f$ ;  $n_f$  – единичный вектор внешней нормали к границе  $f$ ;  $V_i$  – контрольный объем;  $g$  – грань контрольного объема, омываемая газом;  $S_g$  – площадь грани  $g$ ;  $K_g$  – коэффициент теплопередачи со стороны грани  $g$ ;  $T_g$  – температура газа со стороны грани  $g$ .

Правая часть уравнения (12) представляет собой сумму тепловых потоков, поступающих к  $i$ -му контрольному объему за время  $\delta t$  от соседних контрольных объемов посредством теплопроводности ( $\delta Q_\lambda$  (13)) и в результате конвективного теплообмена с газом ( $\delta Q_\alpha$  (14)) прилегающих каналов блока и

окружающей среды (для контрольных объемов, расположенных на границе блока). Тепловыми потоками через торцовые поверхности контрольного объема (в осевом направлении) пренебрегается, принимая во внимание малость величины площади их поперечного сечения.

$$(\delta Q_\lambda)_f = \lambda_c \frac{\bar{T}_f - \bar{T}_l}{l} w \cdot \Delta z \quad (13)$$

$$(\delta Q_\alpha)_g = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_g} + \frac{w/2}{\lambda_c}} \cdot (T_g - \bar{T}_l) \cdot b_g \cdot \Delta z \quad (14)$$

где  $\bar{T}_f$  – температура соседнего по границе  $f$  контрольного объема;  $\alpha_g$  – коэффициент теплоотдачи от газа на  $g$ -ой грани контрольного объема;  $w$  – толщина стенки канала каталитического блока;  $\Delta z$  – толщина контрольного объема в осевом направлении канала;  $b_g$  – ширина грани  $g$ ;  $l$  – расстояние между узлами соседних контрольных объемов

Дискретизация производных в уравнениях (5, 6, 8-10, 12) осуществляется с использованием метода конечных разностей, значения искомых параметров определяются по схеме неявного метода Эйлера.

Алгоритм работы разработанной программы для расчета каталитического блока SCR представлен на Рисунке 4.

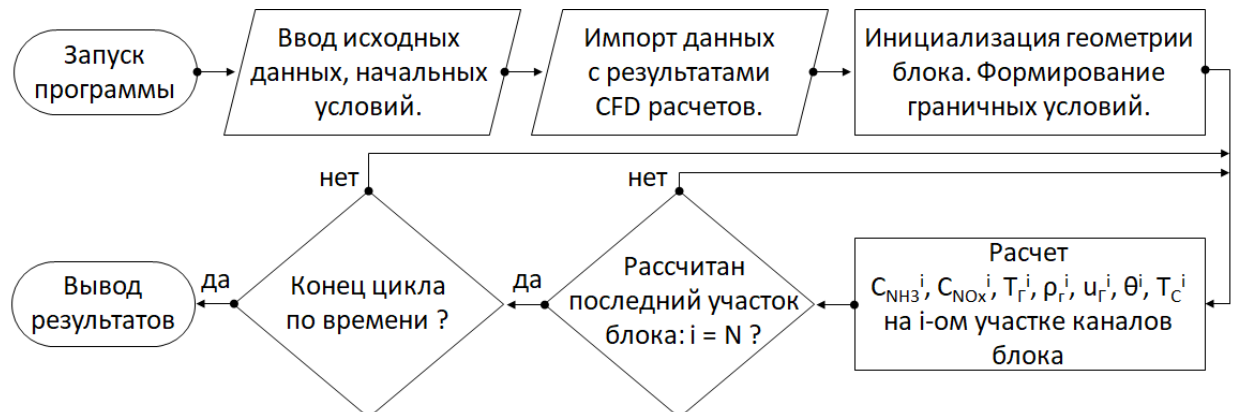


Рисунок 4. Алгоритм работы разработанной программы для расчета каталитического блока SCR

**В третьей главе** диссертации проведена валидация моделей, используемых в разработанной методике расчета систем SCR, по известным опубликованным экспериментальным данным. Сравнительный анализ результатов численных и экспериментальных исследований продемонстрировал качественное согласование данных, что подтвердило применимость выбранных моделей и их настроек.

Валидация математического описания процессов впрыскивания, испарения и разложения водного раствора мочевины с использованием программного комплекса (ПК) ANSYS FLUENT осуществлялась поэтапно.

В рамках первого этапа выполнялась проверка математической модели испарения путем сопоставления соответствующих расчетных и экспериментальных кривых, полученных для одиночных капель в условиях неподвижной среды нагретого воздуха (Рисунок 5). Отмечено приемлемое совпадение результатов.

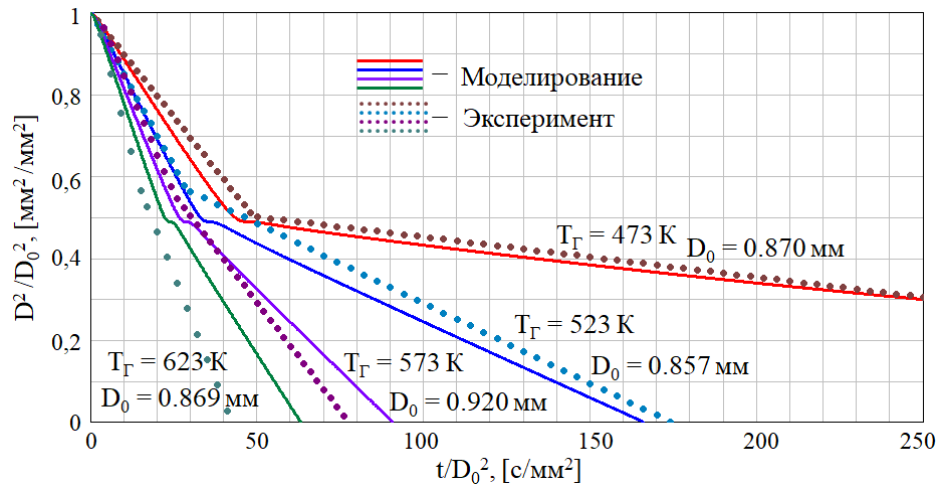


Рисунок 5. Сравнение кривых испарения капле водного раствора мочевины, полученных экспериментальным и расчетным способом ( $D_0$ ,  $D$  – первоначальный, текущий диаметр капли,  $t$  – время,  $T_{\Gamma}$  – температура газа)

На втором этапе проводилась оценка математической модели впрыскивания по результатам сравнения расчетных и экспериментальных значений ширины струи, распыливаемой в центре цилиндрической трубы в направлении движения потока газа (Рисунок 6) при различных значениях его скорости (Таблица 1). Отличие результатов не превысило 5%.

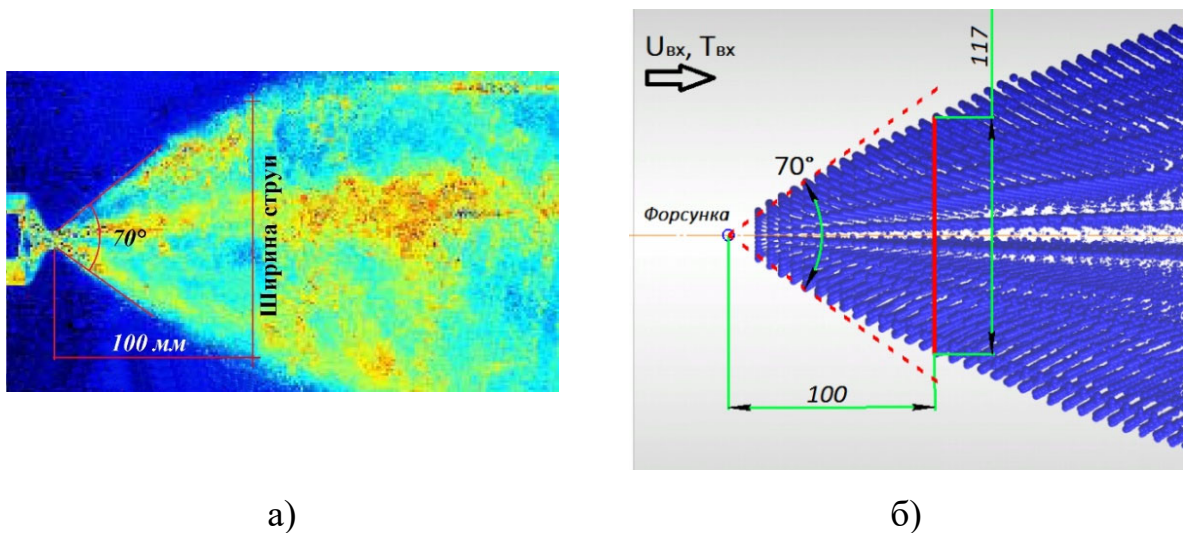


Рисунок 6. Исследование развития струи в потоке газа ( $U_{вх}$ ,  $T_{вх}$  – скорость и температура газа на входе): а) эксперимент; б) численное моделирование

Таблица 1.

Сравнение результатов численного моделирования впрыскивания струи с экспериментальными данными

Температура газа, [K]	Скорость газа, [м/с]	Ширина струи, [мм]		
		Эксперимент	Моделирование	Разность
293	1,3	135	132	2,2 %
	5,4	120	117	2,5 %
	12,2	105	100	4,7 %

На заключительном этапе осуществлялась комплексная валидация математического описания впрыскивания, испарения и химико-термического

разложения водного раствора мочевины, подаваемого в движущийся в цилиндрической трубе поток воздуха. Сопоставлялись расчетные и экспериментальные значения об изменении по длине трубы относительной концентрации аммиака (Рисунок 7), образующегося вследствие протекания указанных ранее процессов. Получено качественное согласование данных.

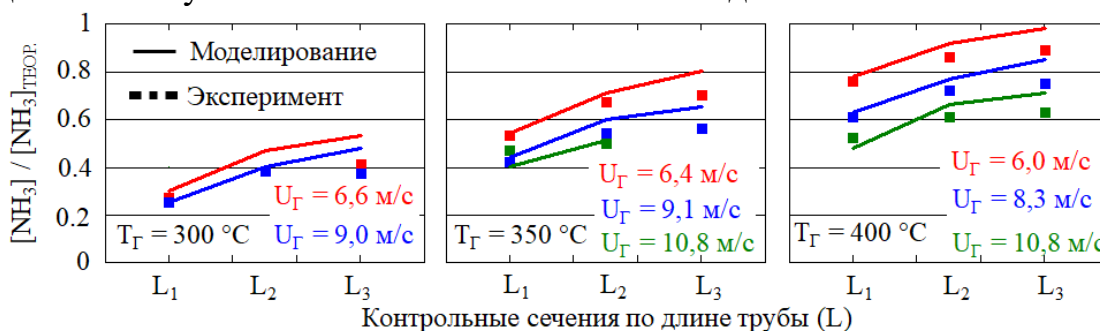


Рисунок 7. Сравнение численных и экспериментальных данных об изменении относительной концентрации аммиака по длине трубы ( $T_{\Gamma}$ ,  $U_{\Gamma}$  – температура и скорость газа в трубе;  $[NH_3]$ ,  $[NH_3]_{\text{ТЕОР}}$  – полученная и теоретически возможная при полном распаде мочевины концентрация аммиака)

Работоспособность предложенной модели восстановления оксидов азота в катализаторе SCR была подтверждена согласованием данных по эмиссии  $NO_x$  из образца каталитического блока, исследованного расчетным и экспериментальным способом (Рисунок 8). Относительная погрешность результатов моделирования не выходила за рамки 7%.

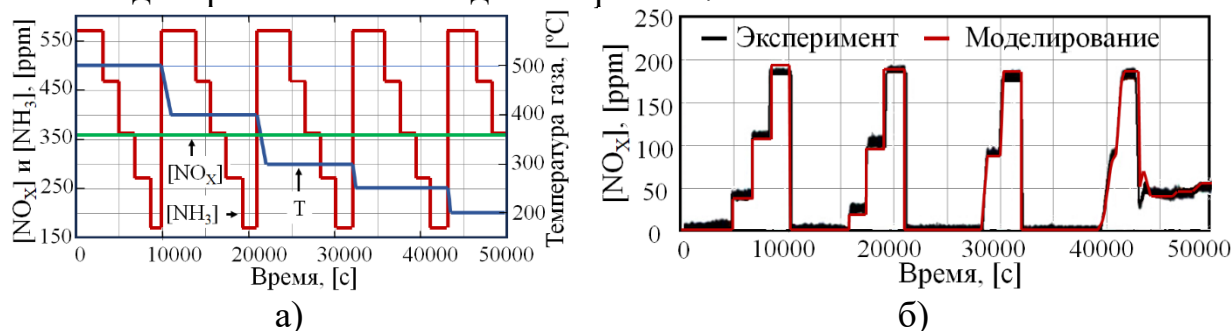
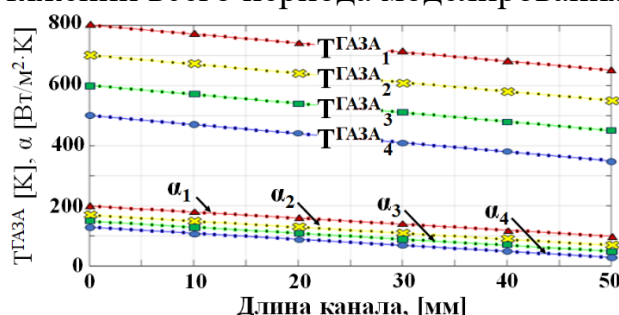
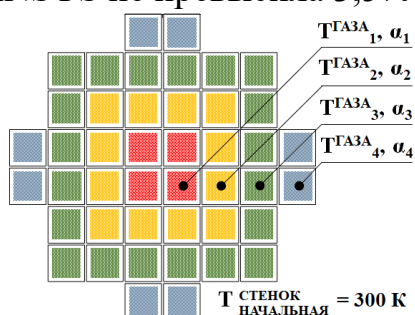


Рисунок 8. Восстановление оксидов азота в каталитическом блоке: а) параметры газа на входе; б) концентрация оксидов азота на выходе

Проверка разработанного математического описания теплообмена в блоке катализатора SCR выполнялась путем сопоставления результатов численных расчетов нестационарного теплового состояния его стенок, полученных с использованием предложенной модели и широко апробированного ПК ANSYS (Рисунок 9). Относительная разница температур в узлах контрольных объемов и в соответствующих точках конечно-элементной модели в ПК ANSYS не превысила 3,5% на протяжении всего периода моделирования.



а)



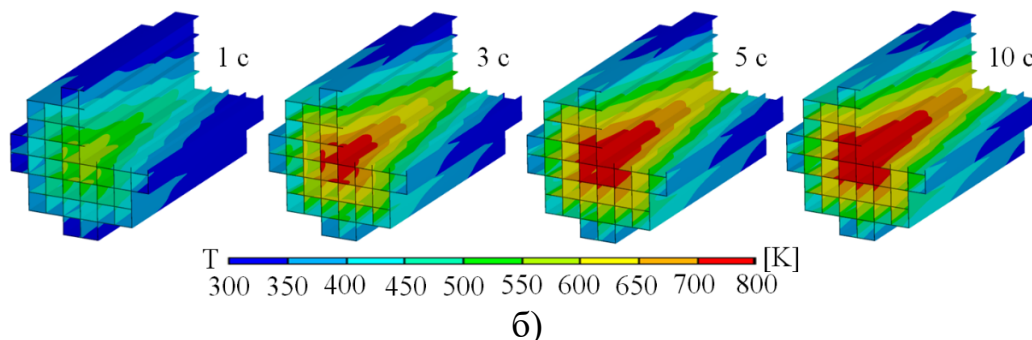


Рисунок 9. Моделирование теплового состояния стенок каталитического блока: а) начальные и граничные условия; б) распределение температур

**В четвертой главе** выполнен анализ применимости разработанной методики расчета и составляющих ее математических моделей для проектирования и оценки эффективности систем SCR транспортных дизелей на примере проведения расчетных исследований опытной конструкции системы нейтрализации двигателя 6ЧН13/14 (ЯМЗ-6566).

Технические характеристики рассматриваемого двигателя представлены в Таблице 2. Данные по выбросам вредных веществ с ОГ были получены в ГНЦ РФ ФГУП «НАМИ» по результатам его испытаний в соответствии с правилами ЕЭК ООН 49-05 по 13-ти режимному циклу.

Таблица 2

Технические характеристики двигателя 6ЧН13/14 (ЯМЗ-6566)

Рабочий объем двигателя, л	11,15
Номинальная мощность, кВт	198,6
Номинальная частота вращения, мин <sup>-1</sup>	1900
Токсичность двигателя без систем нейтрализации ОГ	
Компонент	Значение, [г/кВт·ч]
СО	0,45
НС	0,14
NO <sub>x</sub>	12
PM	0,02

Эскиз опытной конструкция системы нейтрализации двигателя 6ЧН13/14 (ЯМЗ-6566) приведен на Рисунке 10. Она представляет собой участок системы SCR, задача которой заключалась в сокращении эмиссии выбросов NO<sub>x</sub> с ОГ до регламентируемых стандартом Евро-5 значений (2 г/кВт·ч). Ряд геометрических размеров системы были приняты из конструктивных соображений и зафиксированы, длина каталитического блока рассматривалась как варьируемый параметр.

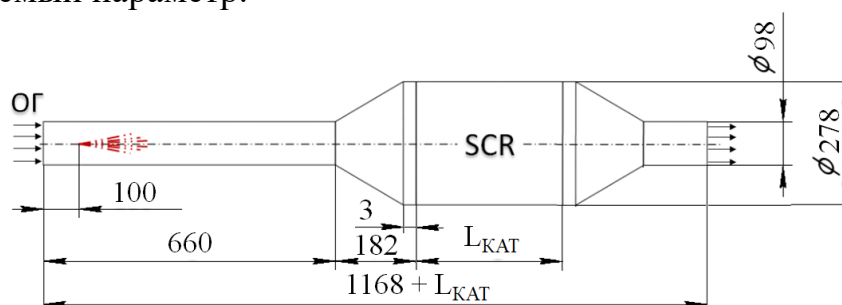


Рисунок 10. Схематичное представление опытной конструкции участка системы SCR двигателя 6ЧН13/14 ( $L_{КАТ}$  – длина каталитического блока)

На первом этапе расчетных исследований с использованием разработанной математической модели была определена минимальная длина блока катализатора, теоретически необходимая для обеспечения требуемого уровня снижения эмиссии  $\text{NO}_x$ .

При моделировании на входе в блок катализатора задавались граничные условия в соответствии с имеющимися экспериментальными данными о 13-ти режимах работы двигателя по испытательному циклу. Распределение параметров потока ОГ на входе в каналы предполагалось полностью равномерным. Принималось равное, теоретически необходимое, соотношение концентраций аммиака и оксидов азота, состав которых рассматривался состоящим исключительно из  $\text{NO}$ . Внешний контур блока считался теплоизолированным. Характеристики каталитического блока, в качестве которого предлагалось использование медь-цеолитового варианта, были взяты из открытых литературных источников.

Результаты моделирования были обработаны в соответствии с методикой, регламентируемой ГОСТ Р 41.49-2003, и получена информация об изменении результирующих значений эмиссии  $\text{NO}_x$  по итогам испытательного цикла в зависимости от длины каталитического блока (Рисунок 11). Минимальная длина блока катализатора, способная обеспечить сокращение выбросов  $\text{NO}_x$  до показателей стандарта Евро-5, составила 131 мм.

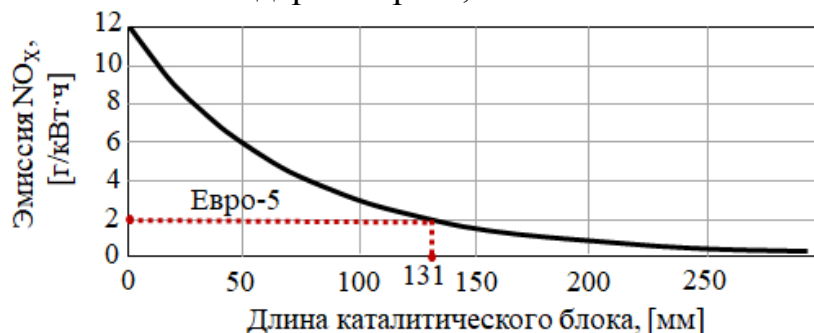


Рисунок 11. Изменение результирующих значений эмиссии  $\text{NO}_x$  по итогам испытательного цикла в зависимости длины каталитического блока

На втором этапе расчетов с использованием ПК ANSYS FLUENT было выполнено моделирование физико-химических процессов на гидролизном участке системы SCR с целью определения действительного распределения параметров потока ОГ на входе в блок катализатора.

На входе в систему задавались ГУ для потока ОГ в соответствии с имеющимися экспериментальными данными. Величина расхода водного раствора мочевины определялась из условия обеспечения равного соотношения концентраций  $\text{NH}_3$  и  $\text{NO}_x$  в случае ее полного разложения. Характеристики форсунки были взяты из открытых литературных источников.

Результаты моделирования для 1-го режима работы двигателя по испытательному циклу представлены на Рисунке 12. По итогу их анализа были выявлены существенные недостатки исходной конструкции гидролизного участка: значительная доля водного раствора мочевины не успевает испариться до блока катализатора и попадает на его стенки, что может привести к закупориванию каналов солевыми отложениями; лишь часть мочевины подверглась химико-термическому разложению до образования  $\text{NH}_3$ , необходимого для протекания каталитических реакций восстановления  $\text{NO}_x$ ; на входе в

блок катализатора наблюдается значительная неравномерность распределения параметров потока газа, которая способствует нерациональному использованию каталитической поверхности.

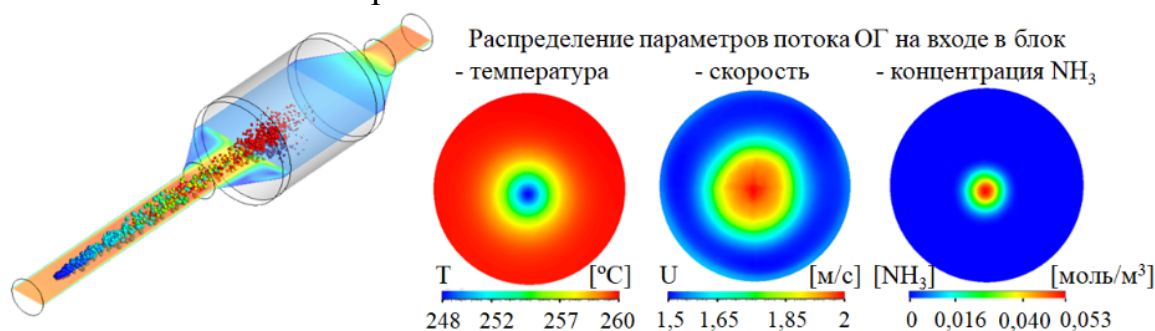


Рисунок 12. Результаты CFD-моделирования гидролизного участка системы SCR

На третьем этапе расчетных исследований была проведена оценка влияния протекающих на гидролизном участке процессов на эффективность восстановления  $\text{NO}_x$  в блоке катализатора.

С помощью разработанной математической модели были выполнены соответствующие расчеты, в которых в качестве входных граничных условий использовались полученные данные CFD-моделирования (Рисунок 12).

Анализ результатов показал, что восстановление  $\text{NO}_x$  происходит лишь в узкой центральной области блока, где присутствует образовавшийся аммиак (Рисунок 12), необходимый для протекания соответствующих химических реакций (3). Следствием этого стало существенное сокращение эффективности очистки ОГ от  $\text{NO}_x$ , которая составила 15,8%, в то время как для случая полного химико-термического разложения мочевины и равномерного распределения параметров ОГ - 75,9% (Рисунок 13).

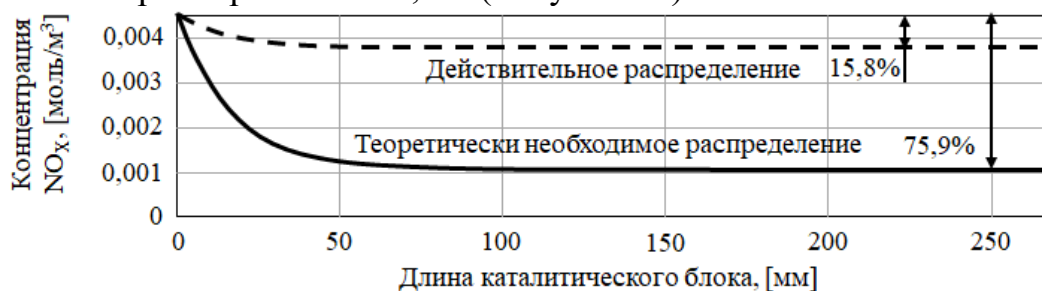


Рисунок 13. Сравнение данных об изменении концентрации  $\text{NO}_x$  по длине блока катализатора в случае теоретически необходимого и действительного распределения параметров ОГ на его входе

Выполненные расчетные исследования и полученные результаты подтвердили работоспособность разработанной методики расчета и составляющих ее математических моделей, а также их применимость для проектирования и оценки эффективности систем SCR транспортных дизелей, позволив определить теоретически необходимую длину блока катализатора для снижения эмиссии  $\text{NO}_x$  с ОГ двигателя 6ЧН13/14 до показателей стандарта Евро-5 и выявив наличие ряда проблем в исходной конструкции гидролизного участка, связанные с обеспечением условий эффективного преобразования впрыскиваемого водного раствора мочевины в аммиак и равномерного распределения параметров потока ОГ по входному сечению блока.



В качестве решения указанных проблем были предложены следующие меры: применение наклонного расположения форсунки для улучшения качества распыливания и испарения водного раствора мочевины; использование статического завихрителя потока (импеллера) после форсунки для интенсификации распада, испарения капель водного раствора мочевины, ее химико-термического разложения, перемешивания образующегося аммиака в потоке ОГ, повышения равномерности распределения параметров ОГ на входе в блок катализатора.

Результаты проведенных аналитических и расчетных исследований, а также сформулированные рекомендации были использованы в ГНЦ РФ ФГУП «НАМИ» при создании опытной конструкции комплексной системы очистки ОГ для автомобильного дизеля типа ЯМЗ-6566 (6 ЧН 13/14), включающей в себя участок системы SCR (Рисунок 14).

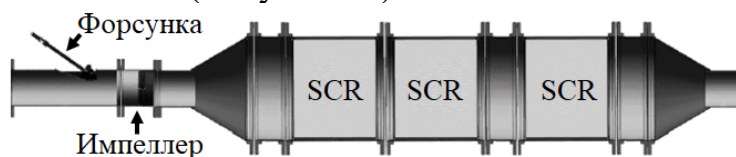


Рисунок 14. Общий вид системы SCR двигателя ЯМЗ-6566, разработанной ГНЦ РФ ФГУП «НАМИ»

Проведенные экспериментальные исследования указанной системы показали, что ее эффективность составляет от 89% до 99% в зависимости от режима работы рассматриваемого дизельного двигателя 6 ЧН 13/14 (ЯМЗ-6566) по испытательному циклу, что обеспечило выполнение двигателем показателей по выбросам  $\text{NO}_x$  на уровне экологических норм Евро-5.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ ПО ДИССЕРТАЦИИ

1. Обзор состояния проблемы показал, что применение численного моделирования при проектировании новых систем SCR и совершенствовании уже существующих конструкций в условиях повышения требований к их эффективности имеет важное прикладное значение.

2. Существенное отличие характерных масштабов времени протекания и размерности процессов впрыскивания/испарения водного раствора мочевины и гетерогенных каталитических реакций в блоке делают целесообразным с точки зрения затрат времени и вычислительных ресурсов использование при их математическом описании разработанного гибридного подхода, основанного на сопряжении методов вычислительной газовой динамики для моделирования первых и пользовательских моделей пониженной размерности – для вторых.

3. Проведенная по известным экспериментальным данным валидация разработанных математических моделей подтвердила их работоспособность и позволила сформулировать практические рекомендации по их настройке.

4. Выполненные расчеты с применением разработанной программы позволили определить теоретически необходимую длину каталитического блока SCR, составившую 131 мм, способную обеспечить сокращение эмиссии  $\text{NO}_x$  двигателем 6ЧН13/14 (ЯМЗ-6566) с исходных 12 г/кВт·ч до регламентированных современным экологическим стандартом Евро-5 2 г/кВт·ч.

5. Проведенные расчетные исследования предложенной конструкции системы SCR для двигателя 6ЧН13/14 (ЯМЗ-6566) подтвердили значительное влияние процессов, протекающих на гидролизном участке, на эффективность восстановления  $\text{NO}_x$ ; для 1-го режима работы двигателя по 13-ти ступенчатому испытательному циклу получено сокращение эффективности очистки ОГ от  $\text{NO}_x$  с 75,9 % для случая полного химико-термического разложения мочевины и равномерного распределения параметров ОГ на входе в блок катализатора до 15,8% в случае учета действительных данных, полученных по результатам CFD моделирования.

6. Разработанные математические модели, результаты проведенных аналитических и расчетных исследований, а также сформулированные рекомендации к системе SCR транспортного дизеля 6ЧН13/14 (ЯМЗ-6566) способствовали разработке в ГНЦ РФ ФГУП «НАМИ» опытной конструкции системы нейтрализации ОГ от  $\text{NO}_x$ , эффективность которой по результатам экспериментальных исследований составила свыше 90%.

## ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Моделирование испарения и термического распада мочевины в системах выпуска дизелей / А.С. Блинов [и др.] // Автомобильная промышленность. 2017. № 10. С. 8-14. (0,75 п.л./0,40 п.л.)

2. Использование мочевины в системах обработки выпускных газов поршневых двигателей/ А.С. Блинов [и др.] // Безопасность в техносфере. 2017. Том 6. № 4. С. 40-49. (1,13 п.л./0,7 п.л.)

3. Ерохов В.И., Надарейшвили Г.Г., А.С. Блинов А.С. Анализ эффективности работы восстановителя оксидов азота отработавших газов транспортных двигателей // Двигателестроение. 2022. № 3. С. 48-63. (2 п.л./0,6 п.л.)

4. Блинов А.С., Надарейшвили Г.Г., Трифонов В.Л. Эффективность системы восстановления оксидов азота // Автомобильная промышленность. 2023. № 2. С. 1 – 10. (1,25 п.л./0,4 п.л.)

5. Blinov A.S., Malastowski N.S., Myagkov L.L. Development of the Model for a Diesel Engine Catalytic Converter // E3S Web of Conferences. 2019. Vol. 140. Art. no 06013. P. 1-5. (0,63 п.л./0,3 п.л.)

6. Blinov A.S., Malastovsky N.S., Bykov A.E. Performance Evaluation of Static Mixers in the Urea Injection Pipe for SCR System // Proceedings of the 5th International Conference on Industrial Engineering (ICIE 2019). 2020. Vol. II 5. P. 1465-1473. (1,13 п.л./0,5 п.л.)

7. Blinov A.S., Malastowski N.S., Myagkov L.L. Methodology for Calculating Diesel SCR Systems// E3S Web of Conferences. 2020. Vol. 220. Art. no 010993. P. 1-7. (0,88 п.л./0,4 п.л.)

8. Blinov A.S., Malastowski N.S., Myagkov L.L. Numerical Simulation of  $\text{NO}_x$  Reduction in a SCR System // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2021.Vol. 1111. Art. no 012009. P. 1-8. (1 п.л./0,5 п.л.)

9. Blinov A. S., Malastowski N. S., Myagkov L. L. Numerical simulation of transient heat transfer of a catalyst substrate //AIP Conference Proceedings. 2023. Vol. 2700. Art. no 050034. P. 1-7. (0,88 п.л./0,4 п.л.)