

基于格子 Boltzmann 方法的柴油机 SCR 脱硝模拟

赵健,金晶,侯封校,寇学森

(上海理工大学能源与动力工程学院,上海 200093)

摘要:基于格子 Boltzmann 方法,对应用于柴油机的选择性催化还原(SCR)进行了介观尺度数值模拟。采用 D2Q9 模型描述速度场,D2Q5 模型描述浓度场,通过耦合化学反应分析了空速比、催化剂孔隙率及颗粒半径对柴油机 SCR 脱硝效率的影响,并描述了介观尺度上 SCR 反应过程中的流动、扩散与反应现象。其中,空速比选取范围为 10 000 ~ 50 000/h,催化剂颗粒半径选取范围为 400 ~ 800 μm ,孔隙率选取范围为 0.65 ~ 0.85。研究结果表明:气体在催化剂中会优先沿较宽的孔道流动和扩散,且在空速比增加时,孔隙较宽处的流速明显增加并降低 NO 转化率,因此,在催化剂生产中应保证孔隙的均匀性;当孔隙率增加时,计算域的入口处的 NO 质量分数降低得更快,但计算域的出口处 NO 质量分数更高,因此在布置催化剂时可考虑在入口布置孔隙率较大的催化剂;当催化剂半径增加时,降低了 NO 转化率,因此在催化剂生产中,应对焙烧温度进行控制,防止催化剂团聚。

关键词:格子 Boltzmann 方法;选择性催化还原;多孔介质

中图分类号:TK09 文献标识码:A DOI:10.16146/j.cnki.rndlgc.2021.08.008

[引用本文格式]赵健,金晶,侯封校,等.基于格子 Boltzmann 方法的柴油机 SCR 脱硝模拟[J].热能动力工程,2021,36(8):48-55. ZHAO Jian, JIN Jing, HOU Feng-xiao, et al. Simulation study on diesel engine SCR denitration by lattice boltzmann method[J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and Power, 2021, 36(8): 48-55.

Simulation Study on Diesel Engine SCR Denitration by Lattice Boltzmann Method

ZHAO Jian, JIN Jing, HOU Feng-xiao, KOU Xue-sen

(School of Energy and Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai, China, Post Code:200093)

Abstract: The mesoscale numerical simulation on the selective catalytic reduction (SCR) applied in diesel engine was performed by the lattice Boltzmann method. D2Q9 model was used to describe the velocity field, and D2Q5 was used to describe the concentration field. The influence of space velocity ratio, catalyst porosity and particle radius on the diesel engine SCR denitration efficiency was analyzed by coupled chemical reactions, and the flow, diffusion and reaction phenomena in the SCR reaction process on the mesoscale were described. The space velocity ratio, catalyst particle radius and porosity were selected in the range of 10 000 to 50 000 per hour, 400 to 800 μm and 0.65 to 0.85 respectively. The study results show that the gas will preferentially flow and diffuse through the wider pores in the catalyst, with the space velocity increasing, the flow velocity at the wider pores increases significantly and the NO conversion rate is reduced. Therefore, the uniformity of the pores should be ensured in the catalyst production. The NO mass fraction at the inlet of computational domain decreases faster and the NO mass fraction at

收稿日期:2021-03-24; 修订日期:2021-04-08

基金项目:国家自然科学基金(51976129);上海理工大学科技发展项目(2019KJFZ192)

Fund-supported Project: National Natural Science Foundation of China (51976129); Science and Technology Development Project of University of Shanghai for Science and Technology (2019KJFZ192)

作者简介:赵健(1993-),男,辽宁鞍山人,上海理工大学硕士研究生。

通讯作者:金晶(1963-),女,山东济南人,上海理工大学教授。

the outlet is higher as the porosity increases. Therefore, when arranging the catalyst, it may be considered to arrange the catalyst with larger porosity at the inlet. When the radius of the catalyst increases, the NO conversion rate is reduced, so in the process of catalyst production, the calcination temperature should be controlled to prevent from catalyst agglomeration.

Key words: lattice Boltzmann method, selective catalytic reduction (SCR), porous media

引言

柴油机尾气中的氮氧化物 (NO_x) 作为一种大气污染物,对环境产生了严重的危害。排放到大气中的 NO_x 不但可以和水、氧气反应生成硝酸,还会通过光化学反应产生光化学烟雾,刺激人的眼睛和呼吸系统,对人的健康产生严重影响^[1-2]。因此,控制 NO_x 排放对环境保护具有重要意义。选择性催化还原 (Selective Catalytic Reduction, SCR) 技术由于具有脱硝效率高、不产生二次污染等优点,在相关领域中被广泛应用^[3]。

目前,国内外很多学者对 SCR 进行了大量的研究。赵彦光等人^[4]对 SCR 的反应特性进行了实验研究,分析了不同工况条件下催化剂对 NH_3 的吸附量和催化还原反应速率的变化趋势。李志军等人^[5]对分子筛和钒基 SCR 催化剂在真实柴油机排气环境下的稳态与瞬态反应特性进行了对比研究,并优化了分子筛 SCR 催化剂的 NH_3 瞬态喷射策略。虽然众多学者对 SCR 的反应特性展开了相关研究,但多为 SCR 脱硝过程的研究及分析,对于催化剂内部的 SCR 脱硝机制及反应规律的研究尚不多见。

催化剂内部的 SCR 脱硝反应作为一种多孔介质内部的非均相反应流动现象,涉及微尺度效应、组分间相互作用及非均相气固反应。因此,反应过程非常复杂,仅靠实验手段和传统的数值方法,难以揭示内部反应流动与质量扩散的详细过程。

格子 Boltzmann 方法 (lattice Boltzmann method) 是一种可以联系宏观与微观、具有介观粒子背景的数值模拟方法,其具有易于处理复杂边界、天然并行性好等优点^[6]。尽管目前利用格子 Boltzmann 方法对 SCR 脱硝过程进行研究的相关报道极少,但对于多孔介质内非均相反应流动问题,之前已有大量的研究。He 等人^[7]将格子 Boltzmann 方法与化学反应相结合,通过边界条件的方式实现了流体-固体壁面间的表面反应。Kang 等人^[8-10]在 He 提出的

模型基础上做出了改进,并提出一种在演化过程中更新固相结构的方法,成功模拟了矿物的溶解与沉淀过程。张婷等人^[11]利用格子 Boltzmann 方法,模拟研究了 CO_2 在多孔 CaO 中的反应特性、流动与扩散特性,模拟结果与实验结果趋势吻合。刘波等人^[12]在二级反应动力学模型的基础上,建立了单颗粒多孔 MgO 吸收 CO_2 的格子 Boltzmann 模型。研究表明,随着 MgO 颗粒粒径的增大,颗粒内渗流速度、 CO_2 浓度和吸附速率均呈现下降趋势。

综上,本文采用对流扩散方程的格子 Boltzmann 方法,在介观层面上,开展柴油机 SCR 催化剂内部脱硝过程的模拟,旨在获得主要运行参数与催化剂结构对柴油机 SCR 的脱硝效率的影响规律,对工程上催化剂的制备与布置具有指导意义。

1 物理模型

图 1 所示的是 SCR 多孔介质催化剂的物理模型。二维管道内随机填充有圆形颗粒的催化剂,上、下管壁为绝热不可渗透边界,混合气体左侧流入、右侧流出,区域内温度保持恒定,忽略化学反应造成的温度变化。模拟所选取的氨氮比均为 1.0, O_2 浓度过量。模型的孔隙率定义为流体域面积与计算域总面积的比值:

$$\varepsilon = 1 - \frac{n\pi d^2}{4HL} \quad (1)$$

式中: d —催化剂颗粒的直径; L 、 H —孔隙区域的长和宽; n —催化剂颗粒的数目。

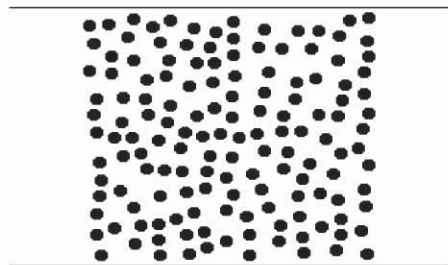


图 1 SCR 多孔介质催化剂的物理模型

Fig. 1 Physical model of SCR porous media catalyst

综合考虑精度问题与程序运行速度等因素后,经网格无关性验证,在格子单位下,网格数取 300×200 ,其中多孔介质区域 200×200 ,左右各留 50 个格子。初始时刻整个区域内速度为 0,所有组分浓度均为 0。左侧入口给定初始速度以及 NO 、 HN_3 和 O_2 的浓度;右侧出口速度场为对流边界条件,各组分浓度均为零梯度;上、下壁面速度场采用无滑移边界,所有组分浓度为零通量。多孔介质内部气固边界流场采用半步长(Half-Way)反弹格式处理。

在众多学者之前的研究结果的基础上^[13-14],进行综合考虑,选取了 3 组 13 种工况,对空速比、催化剂粒径及孔隙率开展研究。研究工况如表 1 所示。

表 1 模拟工况

Tab. 1 Simulated conditions

编号	空速比 GHSV/h ⁻¹	孔隙率 ε	颗粒半径 $r/\mu\text{m}$
A1	10 000	0.75	500
A2	20 000	0.75	500
A3	30 000	0.75	500
A4	40 000	0.75	500
A5	50 000	0.75	500
A6	30 000	0.65	500
A7	30 000	0.70	500
A8	30 000	0.80	500
A9	30 000	0.85	500
A10	30 000	0.80	400
A11	30 000	0.80	600
A12	30 000	0.80	700
A13	30 000	0.80	800

2 格子 Boltzmann 模型

2.1 流动模型

多孔介质内的流动模型一般分为孔隙尺度和表征体元(Representative Elementary Volume, REV)尺度两种。前者尺度较小,可以获得流体在孔隙内流动的详细信息^[15];后者尺度较大,且不关注多孔介质内部细节,而是用渗透率等物理参数描述多孔介质。本文在孔隙尺度下,使用格子 Boltzmann 方法研究柴油机 SCR 过程的流动扩散和化学反应问题,其中多孔介质内的流动模型采用的演化方程为^[15]:

$$f_i(x + e_i\Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau_f}[f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)] \tag{2}$$

其中: $f_i(x, t)$ — t 时刻 x 处的速度为 e_i 的粒子分布函数; τ_f —和黏度有关的松弛时间; e_i —离散速度, $e_0 = (0, 0)$, $e_1 = -e_3 = (1, 0)$, $e_2 = -e_4 = (0, 1)$, $e_5 = -e_7 = (1, 1)$, $e_6 = -e_8 = (1, -1)$; $f_i^{eq}(x, t)$ —平衡分布函数,定义为:

$$f_i^{eq}(x, t) = \omega_i \rho [1 + \frac{3}{2}(e_i u) + \frac{9}{2c^4}(e_i u)^2 - \frac{3}{2c^2}u^2] \tag{3}$$

式中: c —格子速度,文中取值为 1.0,定义 $c = \Delta x/\Delta t$; Δt —时间步长; Δx —一步长距离; ω_i —权重系数, $\omega_0 = 4/9$, $\omega_{1-4} = 1/9$, $\omega_{4-9} = 1/36$; ρ —宏观密度; u —宏观速度。

ρ 和 u 可由分布函数求得:

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i \tag{4}$$

$$u = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^8 f_i e_i \tag{5}$$

2.2 组分模型

组分场采用 Guo 提出的被动标量法^[16]进行描述。将反应物和生成物视为被动标量,认为其对流扩散过程不影响主体气体的流动。同时,Zeiser 等人^[17]的研究表明, D2Q5 模型与 D2Q9 模型具有相同的精度,且 D2Q5 模型运算速度更快。因此,组分场采用 D2Q5 模型进行描述,其演化方程为:

$$g_{i,k}(x + e_i\Delta t, t + \Delta t) - g_{i,k}(x, t) = -\frac{1}{\tau_f}[g_{i,k}(x, t) - g_{i,k}^{eq}(x, t)] \tag{6}$$

式中: $g_{i,k}(x, t)$ —组分 k 在 t 时刻 x 处的速度为 e_i 的粒子分布函数; τ_g —和扩散系数有关的松弛时间; $g_{i,k}^{eq}(x, t)$ —平衡分布函数。

$g_{i,k}^{eq}(x, t)$ 和 e_i 的定义为:

$$g_{i,k}^{eq}(x, t) = \omega_i C_k [1 + \frac{3}{2}(e_i u)] \tag{7}$$

式中: e_i —离散格子速度, $e_0 = (0, 0)$, $e_1 = -e_3 = (1, 0)$, $e_2 = -e_4 = (0, 1)$; ω_i —权重系数, $\omega_0 = 1/3$, $\omega_{1-4} = 1/6$; C_k —组分 k 的浓度,由公式(8)确定。

$$C_k = \sum_{i=0}^4 g_{i,k} \tag{8}$$

3 结果与分析

3.1 不同空速比的影响

空速比是影响 SCR 的 NO_x 转化率的重要指标,其反映了单位时间内流经单位体积催化剂的体积流量,并间接反映了气体在催化剂内的反应时间。

图 2 为不同空速比下的气体流速分布云图。由图可知,随着空速比增加,气体流经催化剂区域的流速明显增加,并且较宽孔道处的流速增大更为明显。这是由于更窄的孔道会使气体受到更大的阻力,从而使气体流向更宽的孔道。而较快的流速必将导致含 NO_x 气体在催化剂区域无法充分反应。因此,在实际催化剂生产中,应使催化剂的孔隙排布均匀,避免局部流速过大造成反应不充分。

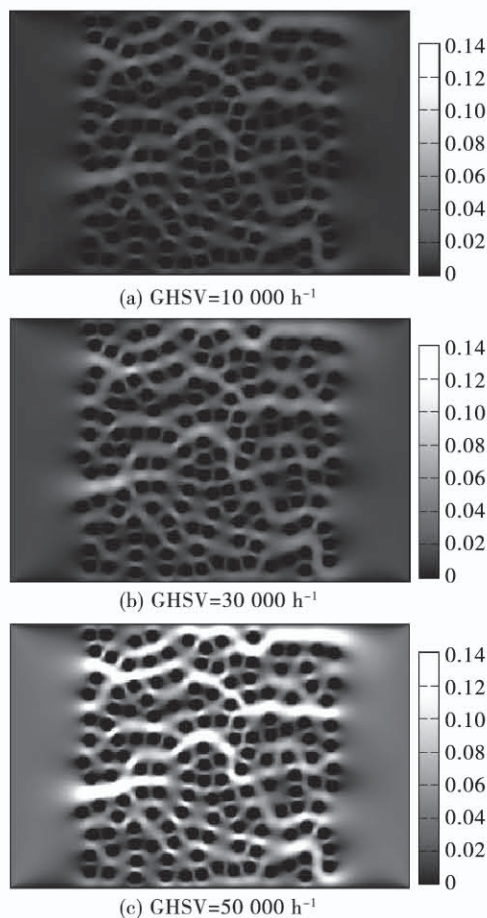


图 2 不同空速比下的气体流速分布云图 (m/s)
Fig. 2 Distribution cloud charts of gas flow rate under various space velocity ratios (m/s)

图 3 为不同空速比下的 NO 质量分数分布云图。由图可知,在相同的位置处,低空速比工况的 NO 质量分数低于高空速比工况;且随着空速比增

加,出口处的 NO 质量分数明显增加。结合图 2 可知,流速较快处的 NO 质量分数明显高于流速慢处。这也证实了文中催化剂孔隙排布应相对均匀的观点。

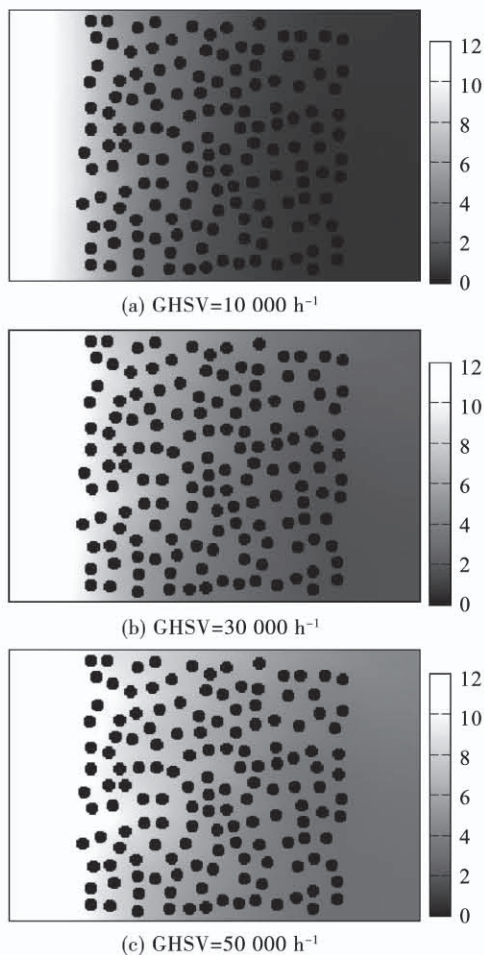


图 3 不同空速比下的 NO 质量分数分布云图 (10^{-3})
Fig. 3 Distribution cloud charts of NO mass fraction under various space velocity ratios (10^{-3})

图 4 为不同空速比下的 NO 转化率的曲线。由图可知,随着空速比增加, NO 转化率呈下降趋势。这是由于空速比的增加使得 NO 在催化剂区域内停留的时间变短,无法充分反应造成的。而在综合考虑了数值误差等影响因素后,认为在研究的工况中, NO 的转化率与空速比呈线性关系。

3.2 不同孔隙率的影响

孔隙率作为柴油机 SCR 催化剂结构最直接的一个量化指标,对脱硝效率有着重要的影响。图 5 为不同孔隙率下的气体流速分布云图。在孔隙率较小的工况中,气体在进入催化剂区域后由于受到催

化剂颗粒的阻挡作用,使得气体在流经孔隙较宽的区域时流速明显增加,这与图 2 中得出的结论是一致的。而孔隙率较大工况下的速度分布相较于孔隙率较小的工况更加均匀。

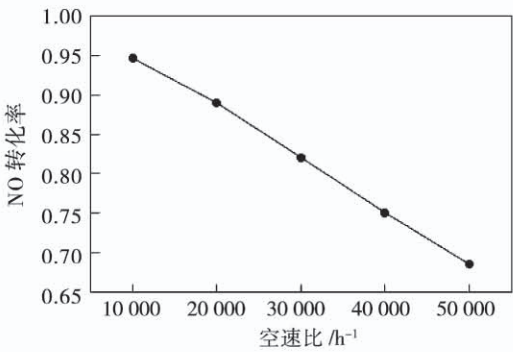


图 4 不同空速比下的 NO 转化率

Fig. 4 NO conversion rates under various space velocity ratios

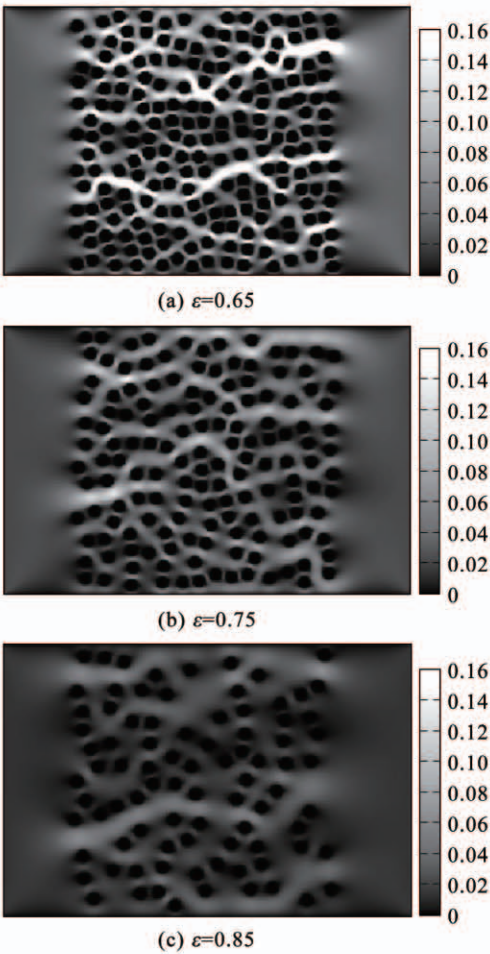


图 5 不同孔隙率下的气体流速分布云图 (m/s)
Fig. 5 Distribution cloud charts of gas flow rate under various porosities (m/s)

图 6 为不同孔隙率下的 NO 质量分数分布云图。由图可知,催化剂的前半段,孔隙率较大工况的 NO 质量分数比孔隙率较小工况的 NO 质量分数下降更快。但在出口端,孔隙率较大工况的 NO 质量分数却高于孔隙率较小工况的 NO 质量分数。结合图 5 可知,孔隙率的增大造成催化剂内部空间更多,使得气体的流速更慢。因此,刚进入催化剂的 NO 气体得到了充分的反应。但随着气体的流动,孔隙率较小的工况所拥有的更多催化剂颗粒使其可以处理更多的 NO 气体的优势得以体现,使得孔隙率较小工况的出口处 NO 质量分数更小。

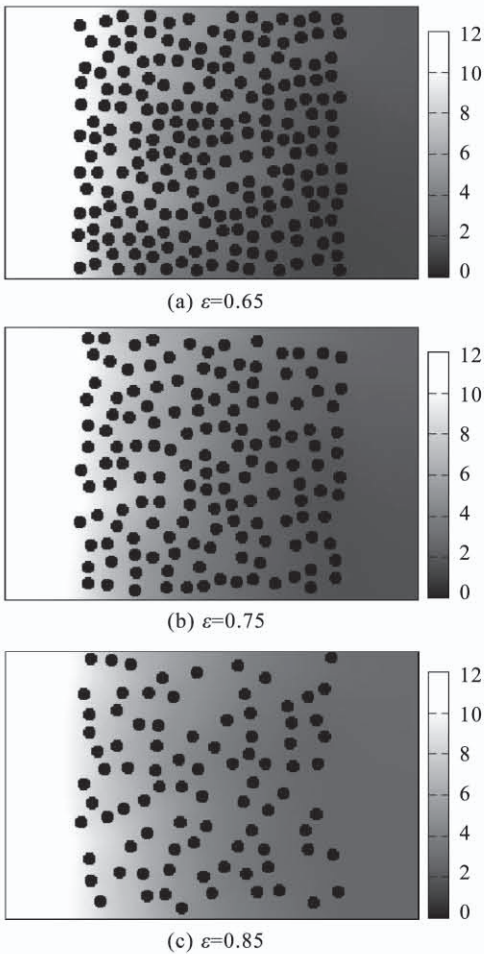


图 6 不同孔隙率下的 NO 质量分数分布云图 (10⁻³)
Fig. 6 Distribution cloud charts of NO mass fraction under various porosities (10⁻³)

图 7 为 NO 转化率随催化剂孔隙率变化的曲线。由图可知,随着孔隙率增加,NO 转化率呈现下降趋势,且在孔隙率为 0.8 ~ 0.85 的区间,NO 转化率下降最为明显。这是由于在催化剂的粒径相等的情况下,孔隙率增加使得催化剂颗粒数量减少,减弱了催化剂与 NO 气体之间的接触,使得 NO 无法充

分反应,造成 NO 转化率降低。

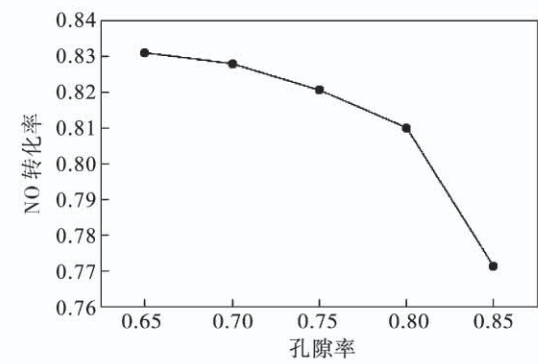


图 7 不同催化剂孔隙率下的 NO 转化率
Fig.7 NO conversion rates under various catalyst porosities

3.3 不同催化剂粒径的影响

在催化剂生产过程中,需经历混炼、预挤出、挤出成型、一段干燥、二段干燥和焙烧等 6 道工序^[18]。而不同的焙烧温度,会使得催化剂形成不同程度的团聚,进而使催化剂颗粒尺寸产生明显变化,影响催化剂性能。由于在本研究中选择圆形催化剂颗粒进行模拟,故选用催化剂粒径作为衡量催化剂尺寸的指标,以表示不同焙烧工艺对催化剂脱硝效率的影响。图 8 为不同催化剂粒径下的气体流速分布云图。

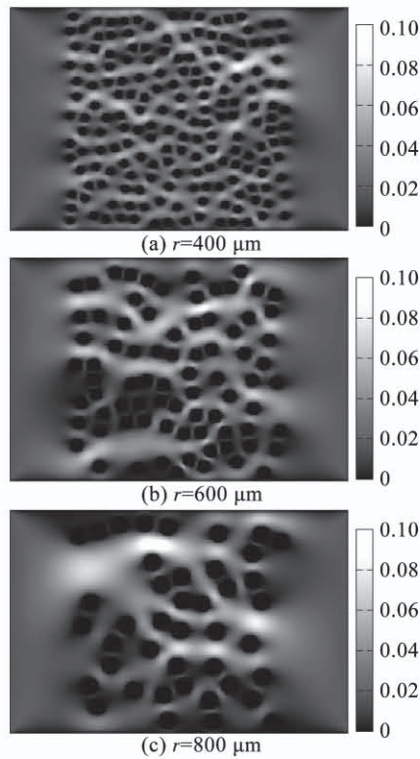


图 8 不同催化剂粒径下的气体流速分布云图 (m/s)
Fig.8 Distribution cloud charts of gas flow rate under various catalyst particle radiuses (m/s)

由图 8 可知,催化剂粒径的增加使得催化剂中部分孔道变宽,进而造成局部流速变大。这一点在粒径为 $800\ \mu\text{m}$ 的工况中尤为明显。因而在实际工程中,可通过控制催化剂粒径来控制催化剂的孔隙间距与气体流经孔隙时的流速。

图 9 为不同催化剂粒径下的 NO 质量分数分布云图。由图可知,各区域不均匀的流速造成了 NO 质量分数不均匀,这一点在催化剂粒径较大时尤为明显。并且,催化剂粒径较大的工况在区域各段的 NO 质量分数均大于催化剂粒径较小的工况。

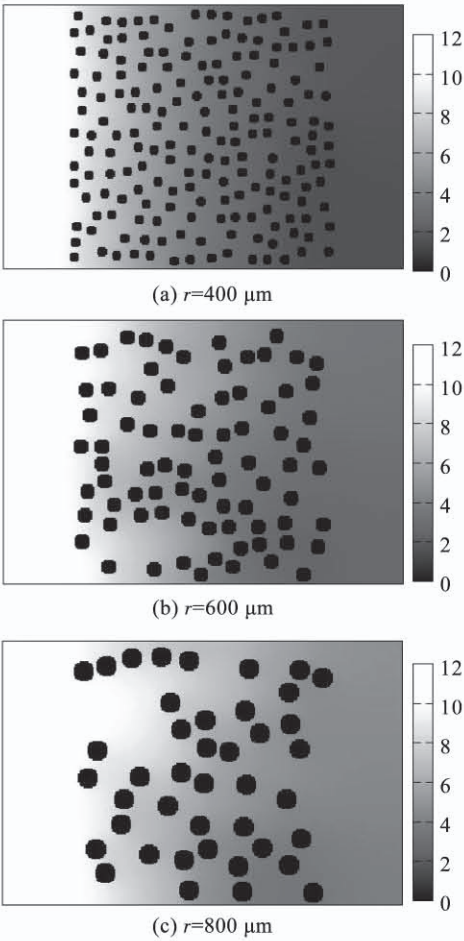


图 9 不同催化剂粒径下的 NO 质量分数分布云图 (10^{-3})
Fig.9 Distribution cloud charts of NO mass fraction under various catalyst particle radiuses (10^{-3})

图 10 为不同催化剂粒径下的 NO 转化率。由图可知,随着催化剂粒径增大,NO 转化率显著下降。这是因为粒径的增加使得催化剂与 NO 的接触减少,从而降低了反应效率。同时,当粒径处于 $500\sim700\ \mu\text{m}$ 时 NO 转化率比处于 $400\sim500$ 与

700 ~ 800 μm 时下降的更快。原因是当粒径范围为 400 ~ 500 μm 和 700 ~ 800 μm 时,粒径的增大并没有对催化剂区域的孔隙宽度造成太大影响;而当粒径范围为 500 ~ 700 μm 时,随着粒径的增大,催化剂的孔隙明显的增大,影响了 NO 气体流动和扩散。图 8 与图 9 中流动和扩散的情况也证实了这一观点。

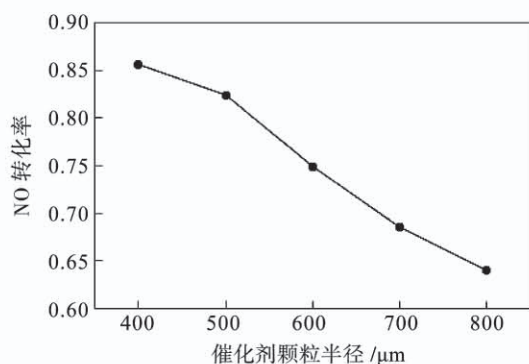


图 10 不同催化剂粒径下的 NO 转化率

Fig. 10 NO conversion rates under various catalyst particle radiuses

4 结 论

(1) 空速比增大时,气体在孔道区域的流速明显加快,使得反应物在催化剂内停留时间变短,造成 NO 转化率降低。因此,催化剂孔隙排布应相对均匀,避免流速过大造成的反应不充分,影响脱硝效率。

(2) 催化剂粒径一定时,孔隙率增大造成了颗粒数量减少。一方面降低了催化剂与气相反应物的接触机率,使 NO 转化率降低;另一方面则降低气体在催化剂中的流速,使气体能够在催化剂中停留更多时间。因此,在布置催化剂时,应在反应器前段布置孔隙率大的催化剂,在中、后段布置孔隙率小的催化剂,既可以保证脱硝效率,又可以降低成本。

(3) 当催化剂颗粒直径增加时,催化剂与气体的接触减少,使得 NO 转化率降低。因此,在催化剂生产中,焙烧温度不应太高,以防止催化剂团聚而形成较大的颗粒。

参考文献:

[1] SKALSKA K, MILLER J S, LEDAKOWICZ S. Trends in NO_x

abatement: A review [J]. Science of the Total Environment, 2010, 408 (19): 3976 – 3989.

[2] PEEL J L, HAEUBER R, GARCIA V, et al. Impact of nitrogen and climate change interactions on ambient air pollution and human health [J]. Biogeochemistry, 2013, 114 (1 – 3): 121 – 134.

[3] 刘向辉, 杨巧文, 王泽宇, 等. Mn-Fe/DPC 催化剂的 NH_3 -SCR 脱硝反应动力学研究 [J]. 矿业科学学报, 2020, 5 (4): 452 – 457.

LIU Xiang-hui, YANG Qiao-wen, WANG Ze-yu, et al. Kinetic study of selective catalytic reduction of NO by NH_3 on Mn-Fe/DPC catalyst [J]. Journal of Mining Science and Technology, 2020, 5 (4): 452 – 457.

[4] 赵彦光, 胡 静, 唐 韬, 等. 柴油机尿素 SCR 催化剂反应特性及氨吸附过程的试验研究 [C]// 南宁: 中国内燃机学会 2009 年学术年会暨中小功率柴油机分会, 基础件分会联合学术年会论文集, 2009: 106 – 110.

ZHAO Yan-Guang, HU Jing, TANG Tao, et al. Experimental study on reaction characteristics and ammonia adsorption process of urea SCR catalyst for diesel engine [C]// Nanning: Proceedings of the 2009 Academic Annual Meeting of the Chinese Society of Internal Combustion Engines, the Small and Medium Power Diesel Engine Branch, and the Joint Academic Annual Meeting of the Basic Components Branch, 2009: 106 – 110.

[5] 李志军, 方熙宇, 刘双喜, 等. 分子筛与钒基 SCR 催化剂瞬态反应特性对比 [J]. 燃烧科学与技术, 2016 (6): 513 – 521.

LI Zhi-jun, FANG Xi-yu, LIU Shuang-xi, et al. Comparative study on response properties of zeolite and vanadium based SCR catalyst [J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2016 (6): 513 – 521.

[6] Chen S, Chen H, Martinez D, et al. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics [J]. Physical Review Letters, 67 (27): 3776 – 3779.

[7] HE X, LI N, GOLDSTEIN B. Lattice Boltzmann simulation of diffusion-convection systems with surface chemical reaction [J]. Molecular Simulation, 2000, 25 (3): 145 – 156.

[8] KANG Q, ZHANG D, CHEN S, et al. Lattice Boltzmann simulation of chemical dissolution in porous media [J]. Physical Review E, 2002, 65 (3): 036318.

[9] KANG Q, LICHTNER P C, ZHANG D. Lattice Boltzmann pore-scale model for multicomponent reactive transport in porous media [J]. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 2006, 111 (B5): B05203.

[10] KANG Q, LICHTNER P C, ZHANG D. An improved lattice Boltzmann model for multicomponent reactive transport in porous media at the pore scale [J]. Water Resources Research, 2007, 43 (12): 2578 – 2584.

- [11] 张 婷,郭照立,柴振华,等. 钙基吸收剂吸收 CO_2 过程的格子 Boltzmann 模拟[J]. 化工学报,2012,63(21):165–171.
ZHANG Ting, GUO Zhao-li, CHAI Zhen-hua, et al. Lattice Boltzmann method for simulating carbon dioxide capture with Ca-based sorbent [J]. CIECS Journal, 2012, 63(21):165–171.
- [12] 刘 波,丁玉栋,廖 强,等. 单颗粒多孔 MgO 吸附剂 CO_2 吸附流动传输的格子 Boltzmann 方法模拟[J]. 中国科学院大学学报,2020,37(2):248–254.
LIU Bo, DING Yu-dong, LIAO Qiang, et al. Lattice Boltzmann simulation of flow and mass transfer of CO_2 adsorption in porous MgO particle [J]. Journal of University of Chinese Academy of Sciences, 2020, 37(2):248–254.
- [13] 李 鑫. 柴油机 SCR 催化剂结构尺寸优化研究[D]. 大连:大连海事大学,2014.
LI Xin. Optimization study of structure and dimension for diesel engine SCR catalyst[D]. Dalian: Dalian Maritime University, 2014.
- [14] 龚金科,张文强,谭 理,等. SCR 反应中 NH_3 的存储释放特性及影响因素的数值研究[J]. 湖南大学学报:自然科学版,2012,39(1):32–36.
GONG Jin-ke, ZHANG Wen-qiang, TAN Li, et al. Numerical study of the storage-release characteristics and the influencing factors of NH_3 in selective catalytic reduction reaction[J]. Journal of Hunan University: Natural Science Edition, 2012, 39(1):32–36.
- [15] 郭照立,郑楚光. 格子 Boltzmann 方法的原理及应用[M]. 北京: 科学出版社,2009.
GUO Zhao-li, ZHENG Chu-guang. Theory and applications of lattice Boltzmann method[M]. Beijing: Science Press, 2009.
- [16] GUO Z, SHI B, ZHENG C. A coupled lattice BGK model for the Boussinesq equations [J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2002, 39(4):325–342.
- [17] ZEISER T, LAMMERS P, KLEMM E, et al. CFD-calculation of flow, dispersion and reaction in a catalyst filled tube by the lattice Boltzmann method[J]. Chemical Engineering Science, 2001, 56(4):1697–1704.
- [18] 华攀龙,于光喜,华 杰,等. 蜂窝式 SCR 脱硝催化剂制造中几个关键工序的技术分析[J]. 机械设计与制造工程,2015(7):71–73.
HUA Pan-long, YU Guang-xi, HUA Jie, et al. Technical analysis on several key procedures for the cellular SCR denitration catalyst manufacturing [J]. Machine Design and Manufacturing Engineering, 2015(7):71–73.

(孙嘉忆 编辑)