

ANSYS



仿真
新时代

2017 ANSYS用户技术大会

中国·烟台

工业燃烧器仿真分析 基于复杂机理的气流床气化炉模拟研究

张国军 技术经理

zhanggj@sinoflow.com.cn

北京中润汉泰科技有限公司

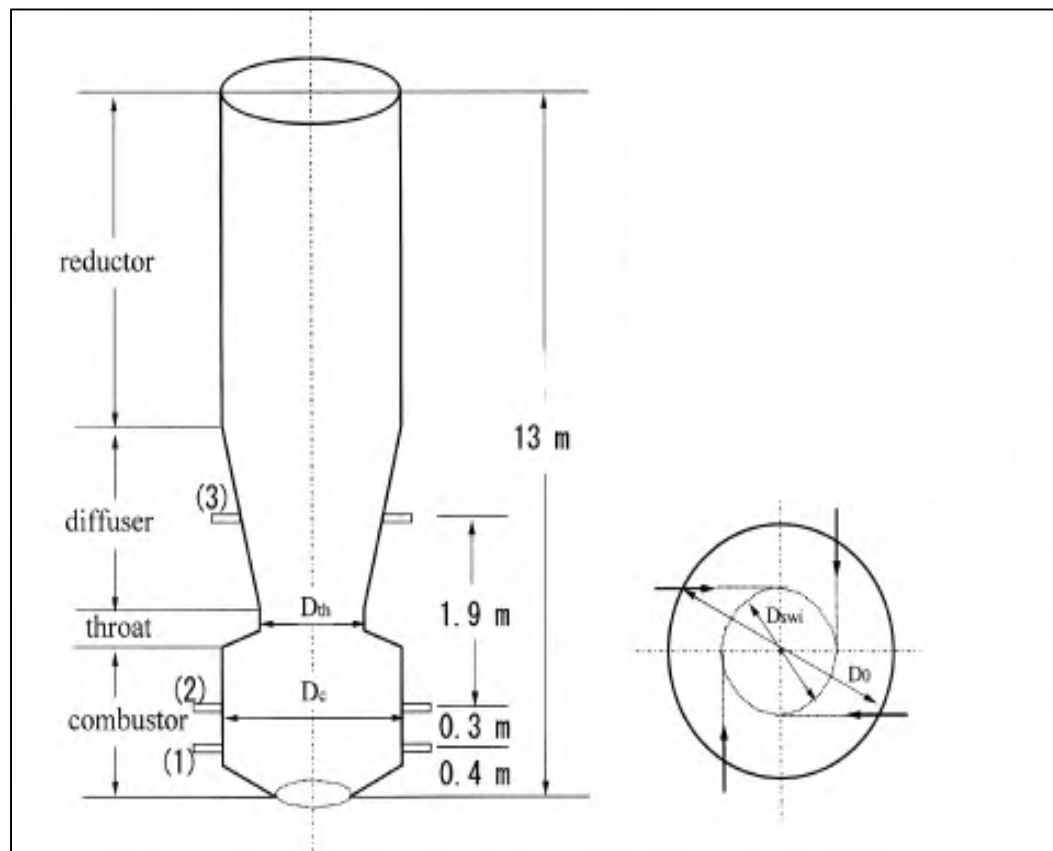
目录

- 研究内容
- 反应机理
- 三维模拟
- 降阶模拟
- 总结

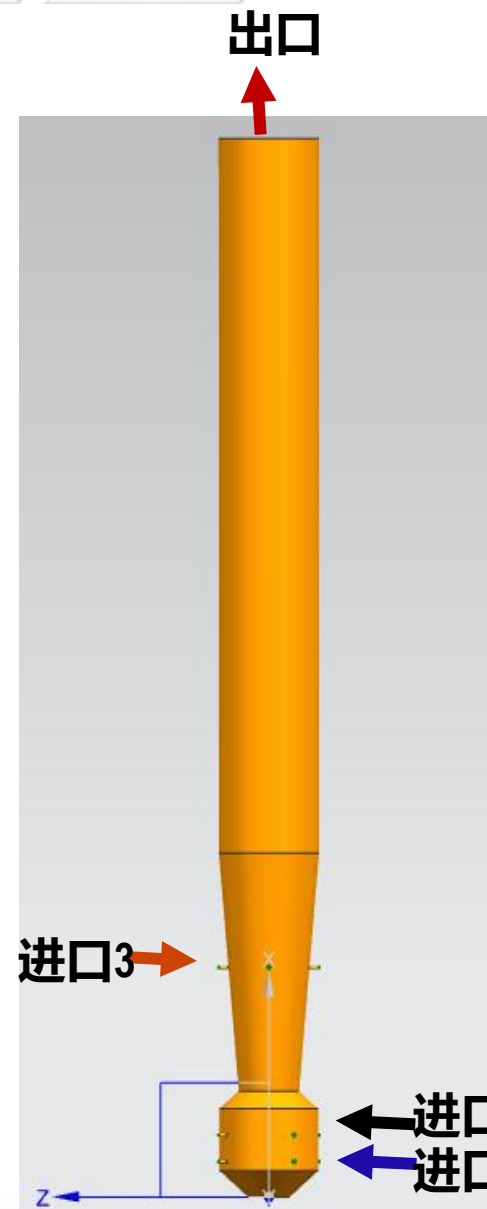
研究内容

- **气流床煤气化是将气化剂（氧气和水蒸气）夹带着煤粉或煤浆，通过特殊喷嘴送入炉膛内。在高温辐射下，氧煤混合物瞬间着火、迅速燃烧，产生大量热量。**
- **特点**
 - 煤的局部氧化
 - ✓ 贫氧环境
 - ✓ 耗氧量远远低于燃烧用量
 - 气化产物：合成气
 - ✓ 主要由CO、H₂和CH₄
- **本文研究对象为一台给煤量为 200t/d 的气化炉，通过三维模型与降阶模型的耦合求解，得到更为详细的浓度和组分分布。**

气化炉模型

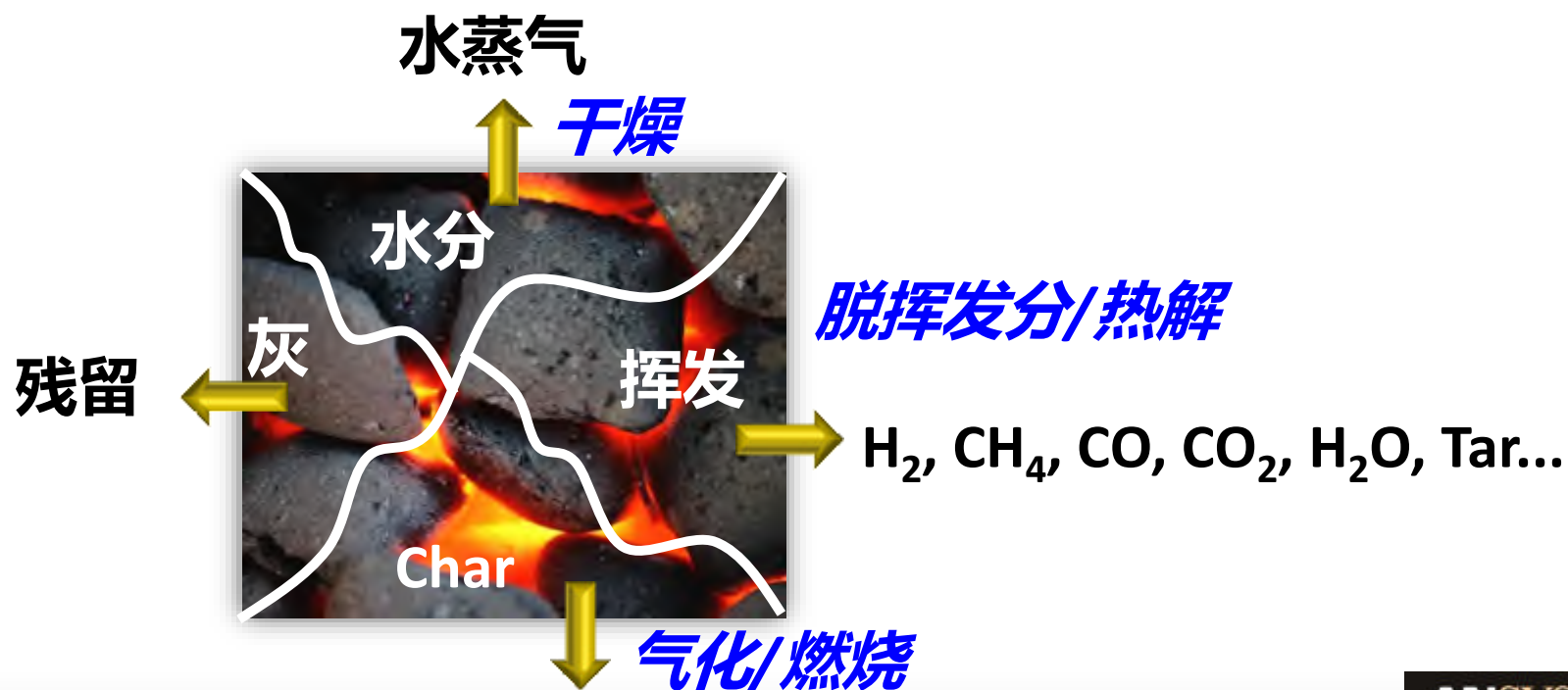


- 200T/D



固体燃烧

- 工业上用的燃料大部分是固体碳燃料
 - 煤，生物质，石焦油，等等
- 固体气化/燃烧



气化模拟难点

脱挥发分

怎样把已知的**元素组分**转化成**组分组成**，同时保证质量和焓守恒？

反应

包括哪些反应以及如何获取反应速率数据？

收敛和稳定

如何得到稳定的收敛结果？

验证

结果是否正确？

挥发分析出

- 代表性的挥发性元素

- C, H, O, N, S

- 需要将元素转换成组分

- 挥发分析出 → 气态的挥发分析出

- 质量守恒方程

$$\checkmark \quad C = C_{CO} + C_{CH_4}$$

$$\checkmark \quad H = H_{H_2S} + H_{CH_4} + H_{H_2O} + H_{H_2}$$

$$\checkmark \quad O = O_{CO} + O_{H_2O} + O_{O_2}$$

$$\checkmark \quad N = N_{N_2}$$

$$\checkmark \quad S = S_{H_2S}$$

- 已知 → 5 (C, H, O, N, S)

- 未知 → 7 (CO, CH₄, H₂S, H₂O, H₂, O₂, N₂)

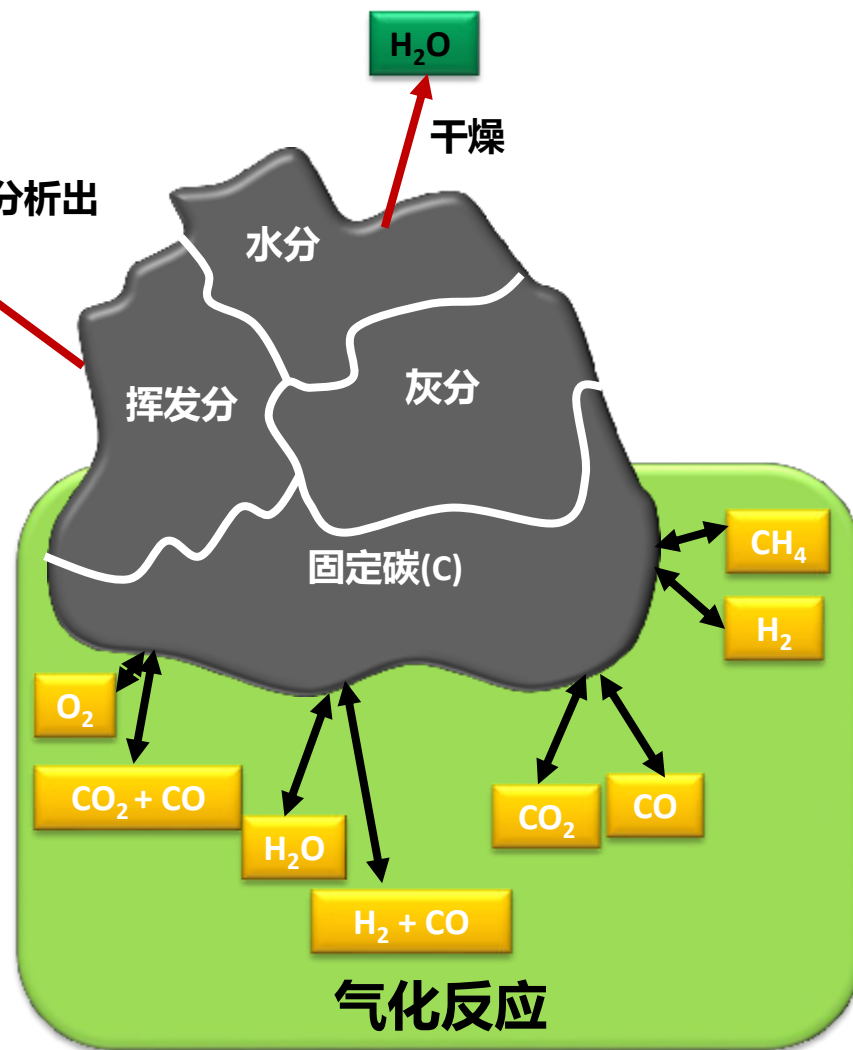
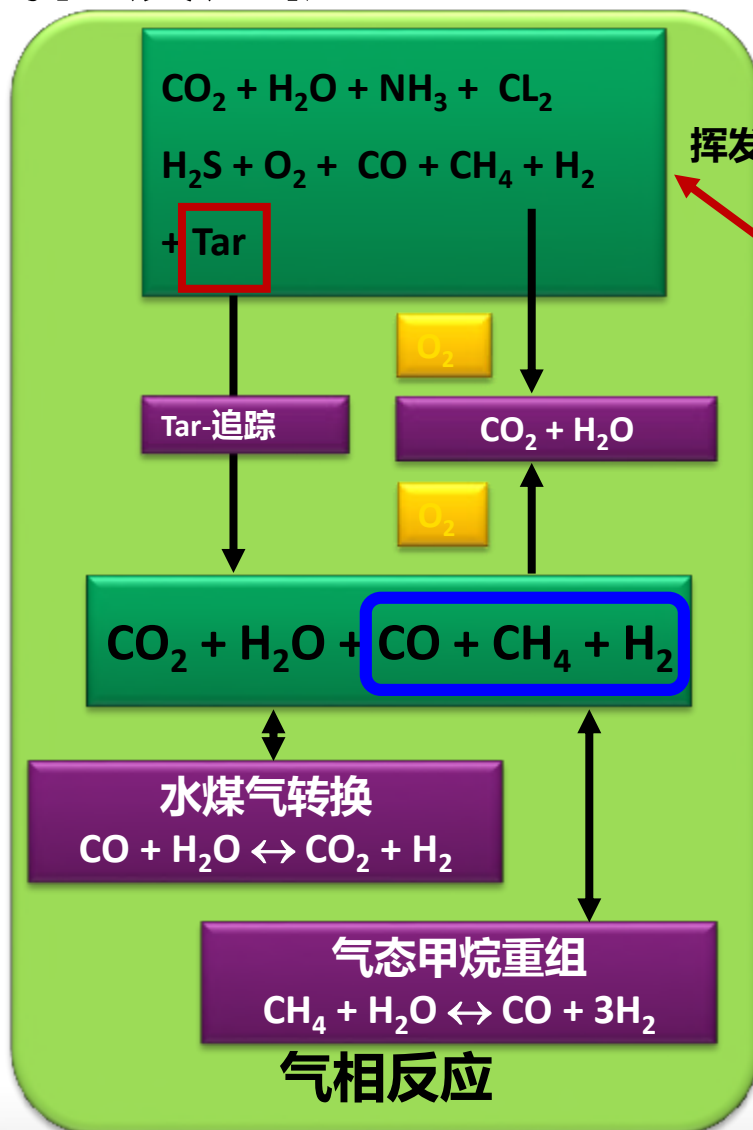
挥发分析出

- 需要通过两种假设来闭合方程
- 通过假定的气相反应模拟挥发分析出
- 挥发分 $\rightarrow a \text{ CO} + b \text{ CH}_4 + c \text{ H}_2\text{S} + d \text{ H}_2 + e \text{ N}_2 + f \text{ H}_2\text{O} + g \text{ O}_2 + h$

Tar

- 计算每一个元素的质量确保质量守恒
- 通过Tar计算剩下的C
- 计算标准状态下挥发分的焓
 - 确保燃料的整体热值守恒

气化反应机理



Syamlal & Bissett (1992), Wen et. al. (1981), Peters (1979), Westbrook & Dryer (1981)

反应机理：气相（9步）

Reaction	A	Ea (J/kmol)	N1	N2	N3	Reference
$\text{Vol} \rightarrow \text{CO} + \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{S} + \text{H}_2 + \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2 + \text{Tar}$	2.119e+11	2.027e+08	1.5	-	-	Westbrook and Dryer, Methane comb (1981)
CO oxidation reaction: $\text{CO} + 0.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$	2.239e+12	1.7e+08	1	0.25	0.5 (H ₂ O)	Westbrook and Dryer (1981)
Forward water-gas shift reaction (FWGS): $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	2.35e+10	2.88e+08	0.5	1	-	Bustamante et al. (2005) (At high pressure)
Reverse water-gas shift reaction (RWGS): $\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	1.785e+12	3.260e+08	1	0.5	-	Equilibrium with FWGS
Hydrogen oxidation: $\text{H}_2 + 0.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$	9.87e+08	3.1e+07	1	1	-	ANSYS FLUENT
Reverse of hydrogen oxidation: $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2 + 0.5 \text{O}_2$	2.06e+11	2.728e+08	1	-	-	Equilibrium with Hydrogen oxidation
Methane oxidation: $\text{CH}_4 + 1.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	5.012e+11	2e+08	0.7	0.8	-	Westbrook and Dryer (1981)
Steam methane reforming: $\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 3 \text{H}_2$	5.922e+08	2.09e+08	0.5	1	-	Hou and Hughes (2001)
Tar oxidation reaction: $\text{Tar} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}$	1e+15	1e+08	1	0.5	-	Estimated

反应机理：颗粒表面（4步）

Reaction	A	Ea (J/kmol)	N1	Reference
Char combustion: $C<S> + 0.5 O_2 \rightarrow CO$	300	1.3e+08	0.65 (O ₂)	Wu et al. (2010)
CO ₂ gasification: $C<S> + CO_2 \rightarrow 2 CO$	2224	2.2e+08	0.6 (CO ₂)	Wu et al. (2010)
H ₂ O gasification: $C<S> + H_2O \rightarrow CO + H_2$	42.5	1.42e+08	0.4 (H ₂ O)	Wu et al. (2010)
H ₂ gasification: $C<S> + 2 H_2 \rightarrow CH_4$	1.62	1.5e+08	1 (H ₂)	Wu et al. (2010)

计算模型

- **湍流：Realizable k- ϵ 模型**
- **离散相：DPM模型**
 - 煤粉脱挥发分
 - ✓ Two-competing rates model
 - Char氧化和气化反应
 - ✓ Multiple particle surface reaction model
 - 水分蒸发
 - ✓ Wet Combustion
- **辐射：DO模型**
- **反应：Species Transport , finite rate model/Eddy dissipation**
 - 9步气相反应
 - 4步颗粒表面反应

模型参数

煤粉分析 (wt%)

挥发分	46.7
固定碳	35.8
水分	5.3
灰分	12.1
HHV, Kcal/kg	6545.6

元素分析 (wt%)

C	78.25
H	6.5
O	13.9
N	1.13
S	0.22

气体流量 (kg/s)

进口1	4.708
进口2	4.708
进口3	1.832
压力 (MPa)	2.7

颗粒流量 (kg/s)

进口1	0.472
进口2	1.112
进口3	1.832

粒径分布 (μm)

10%	150
10%	100
20%	40
20%	20
20%	10
20%	4

反应设置

Number of Reactants: 1 Number of Products: 7

Species	Stoich. Coefficient	Rate Exponent
vol	1	1.5

Species	Stoich. Coefficient	Rate Exponent
co	0.414	0
h2	1.488	0
ch4	0.086	0
h2o	0.046	0
h2s	0.0036	0
n2	0.021	0
tar	1.039	0

挥发分机理设置

Reactions

Mixture: coal-volatiles-air Total Number of Reactions: 13

Reaction Name: reaction-7 ID: 7 Reaction Type: ☐ Volumetric ☐ Wall Surface ☒ Particle Surface

Number of Reactants: 2 Number of Products: 1

- | Species | Stoich. Coefficient | Rate Exponent |
|---------|---------------------|---------------|
| c<s> | 1 | 0 |
| o2 | 1 | 0.65 |

Species	Stoich. Coefficient	Rate Exponent
co2	1	0
- | Species | Stoich. Coefficient | Rate Exponent |
|---------|---------------------|---------------|
| c<s> | 1 | 0 |
| co2 | 1 | 0.6 |

Species	Stoich. Coefficient	Rate Exponent
co	2	0
- | Species | Stoich. Coefficient | Rate Exponent |
|---------|---------------------|---------------|
| c<s> | 1 | 0 |
| h2o | 1 | 0.4 |

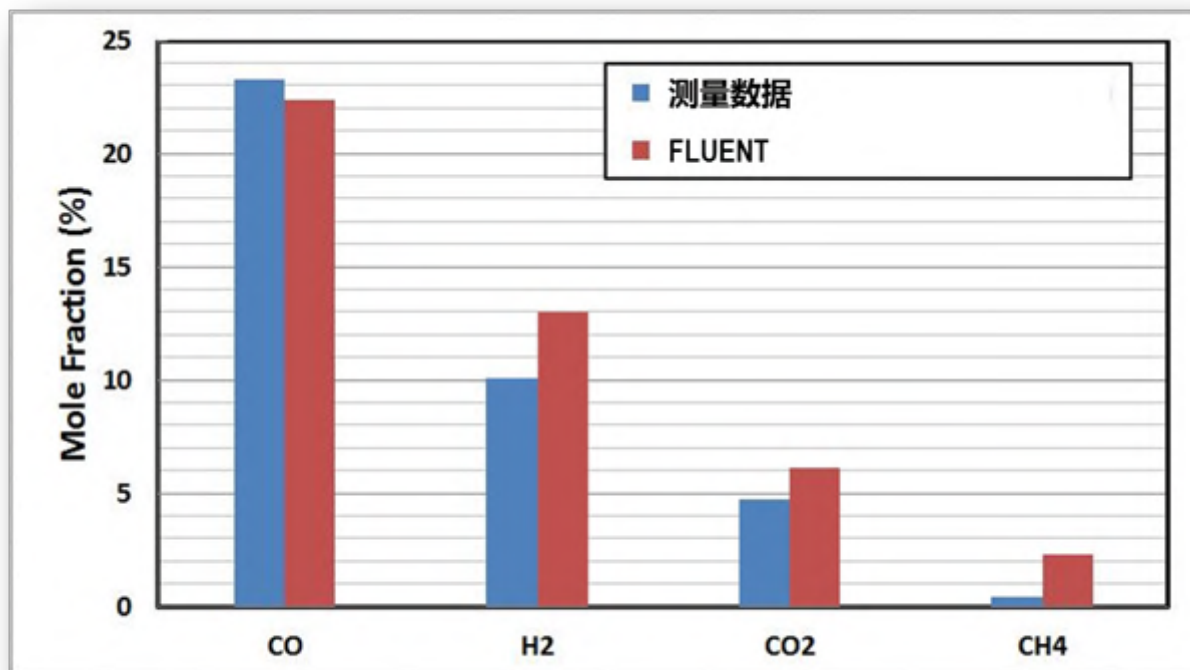
Species	Stoich. Coefficient	Rate Exponent
co	1	0
h2	1	0
- | Species | Stoich. Coefficient | Rate Exponent |
|---------|---------------------|---------------|
| c<s> | 1 | 0 |
| h2 | 2 | 1 |

Species	Stoich. Coefficient	Rate Exponent
ch4	1	0

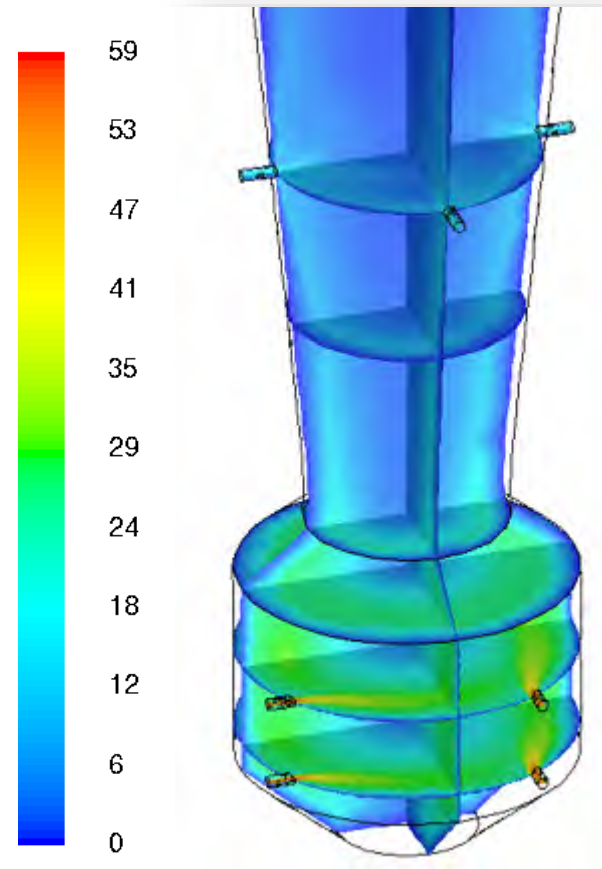
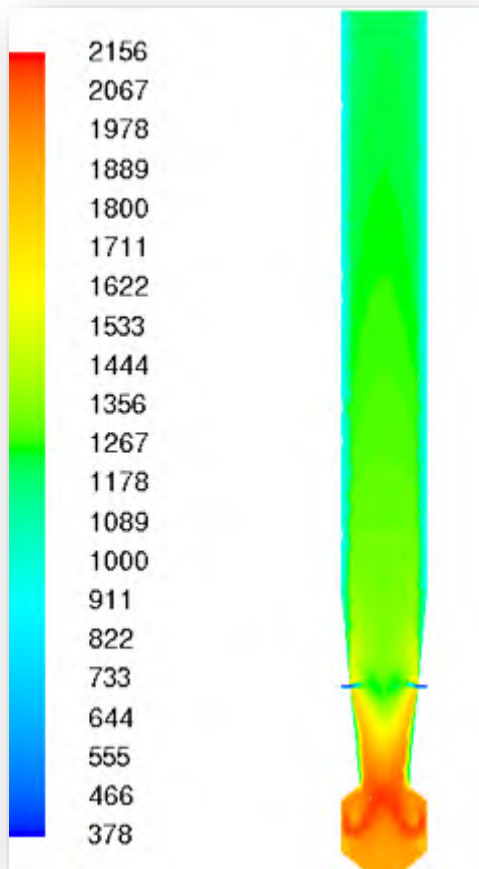
Char反应机理设置

计算结果

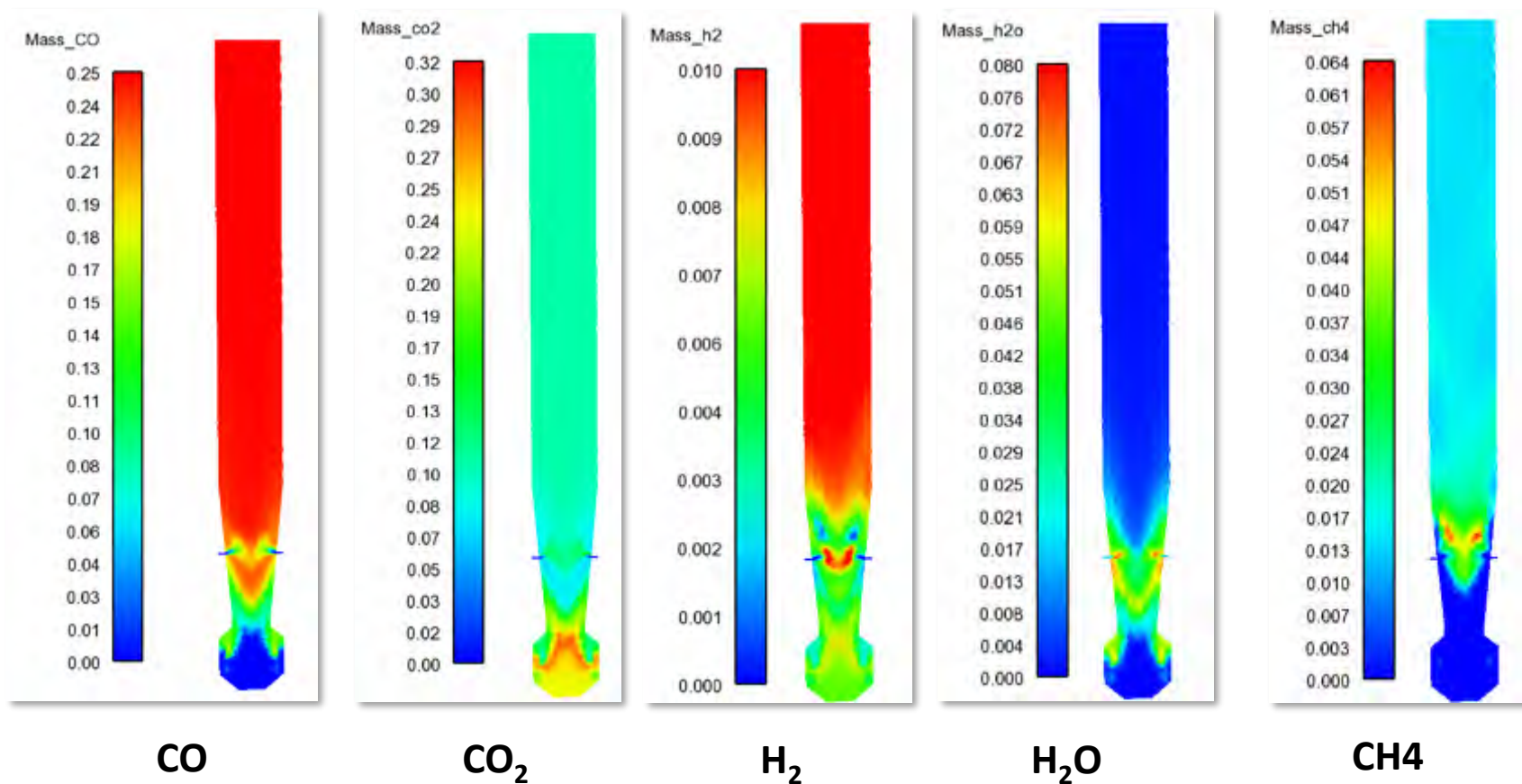
摩尔分数 (%)	CO	H2	CO2	CH4
测试数据	23.3	10.1	4.7	0.4
FLUENT	22.4	13.0	6.0	2.2



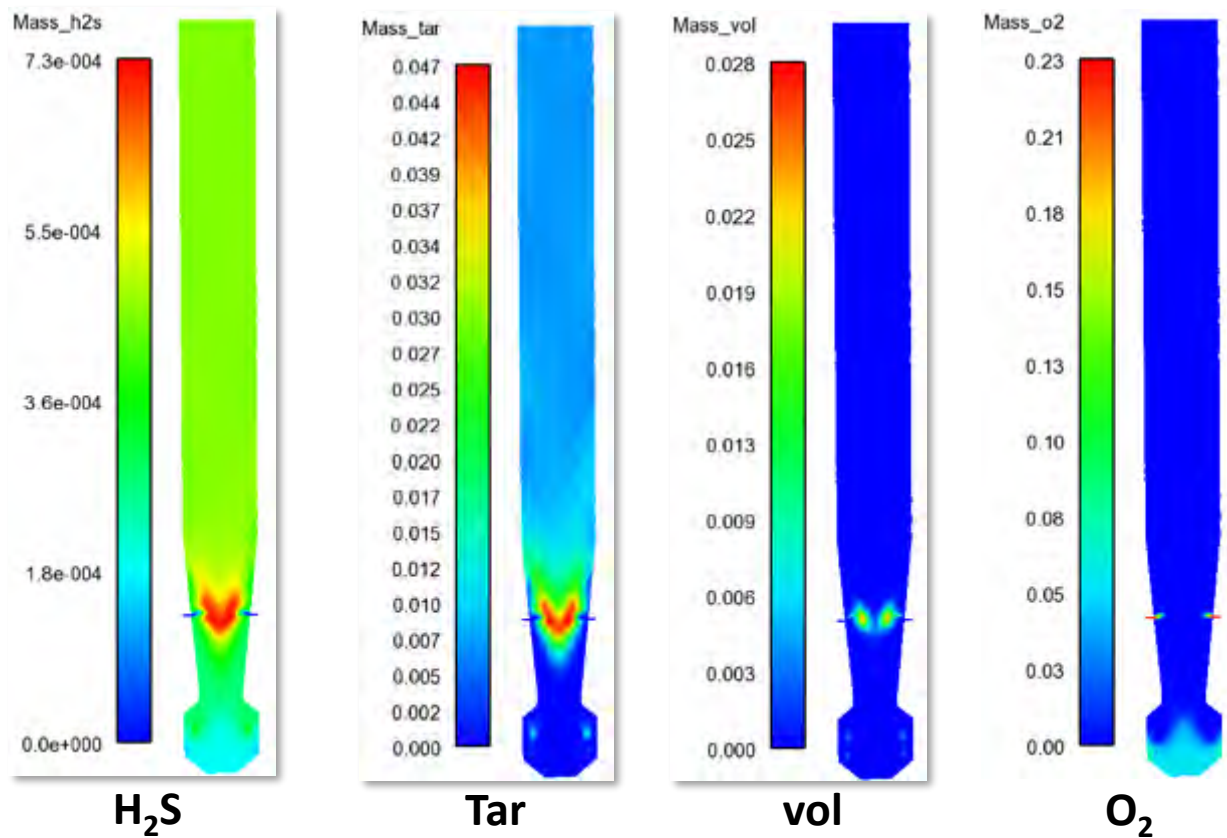
计算结果



计算结果



计算结果



降阶模拟

- 为什么用降阶模拟？
 - 燃烧精度
 - 反应机理规模
- 利用ENERGICO可以把3D FLUENT结果降阶成0D和1D模型，这样就具备将详细燃烧化学与计算流体力学进行无缝连接的能力，可以在不牺牲求解复杂流体动力学精度的基础上，充分利用详细燃烧反应机理的优势。

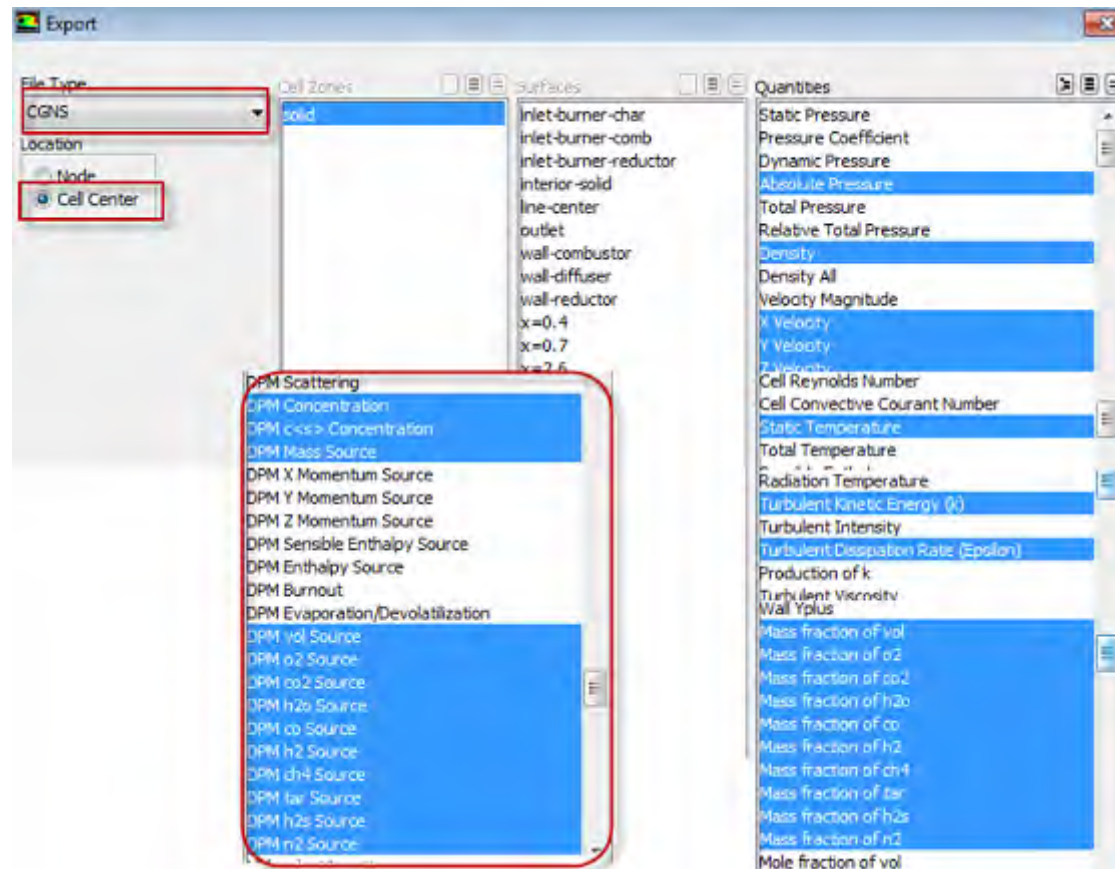
输出CGNS格式

• 变量

- 坐标、速度
- 压力、温度、组分质量分数，密度
- k/ϵ

• DPM

- DPM浓度
- 所有气相组分的DPM源项



DPM处理方法

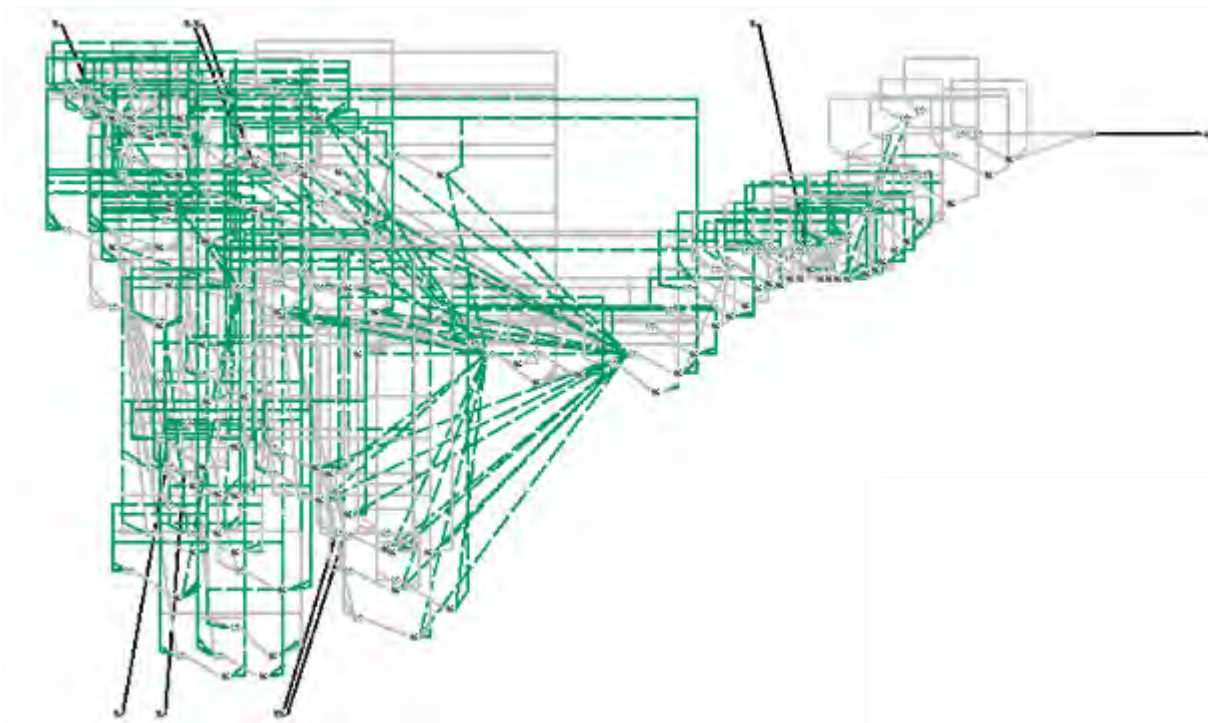
- 气相组分

$$\dot{m}_k = Y_k \times \text{DPM_vol_Source}$$

- Char是在CFD的颗粒表面氧化反应中所有气相组分质量源项之和

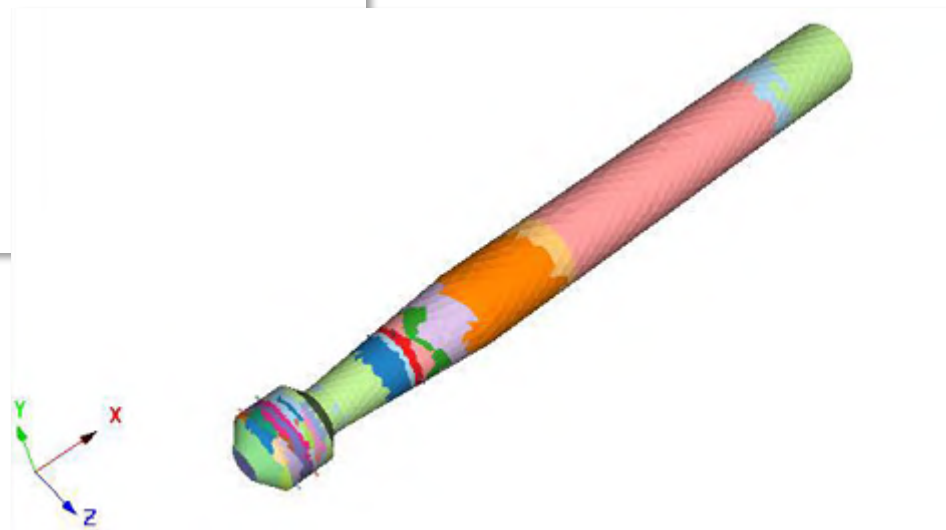
$$\begin{aligned} \dot{m}_{char} = & \text{DPM_O2_Source} + \text{DPM_CO2_Source} \\ & + \text{DPM_CO_Source} + \text{DPM_H2O_Source} \\ & + \text{DPM_H2_Source} + \text{DPM_CH4_Source} \end{aligned}$$

降阶模型



- 394组分
- 2895步反应

- 利用ERNs，把三维几何降阶成95个1D理想反应器模型



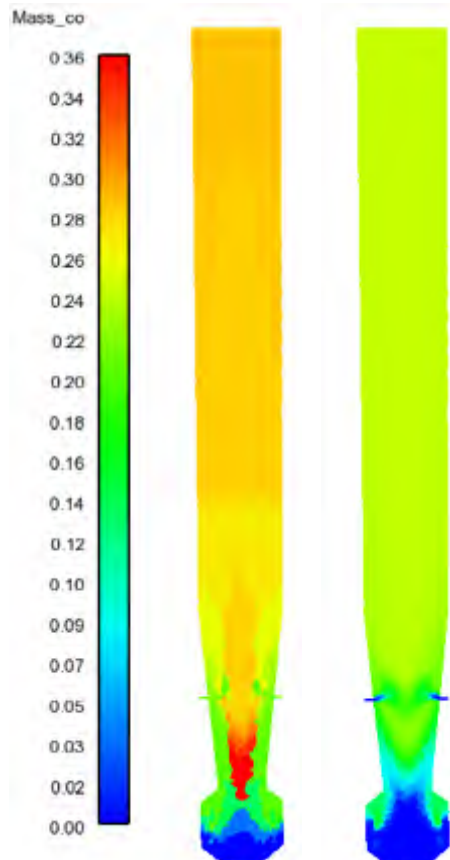
出口处结果对比

- 出口处主要气体的摩尔分数
- Fluent和Energico的计算结果，都与测试数据吻合较好

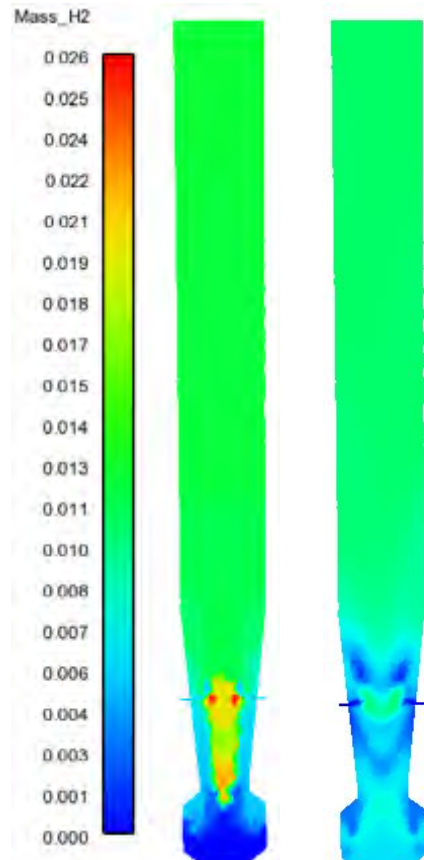
摩尔分数 (%)	CO	H2	CO2	CH4
测试数据	23.3	10.1	4.7	0.4
FLUENT	22.4	13.0	6.0	2.2
ERN	24.43	14.71	3.25	1.65

计算结果对比

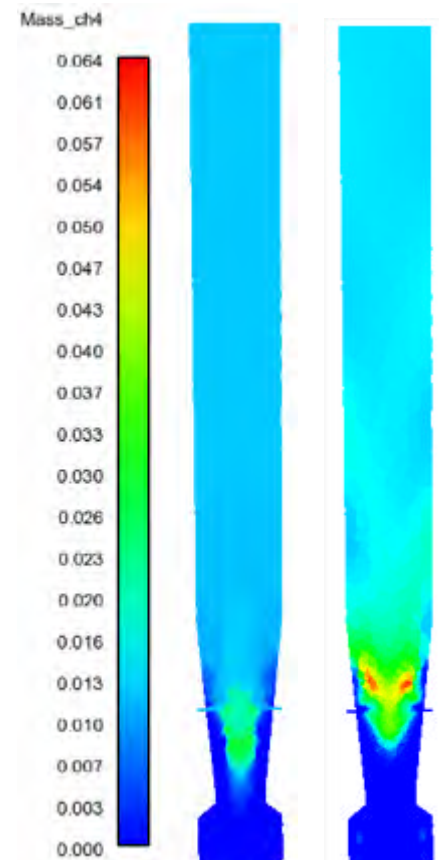
CO



H₂

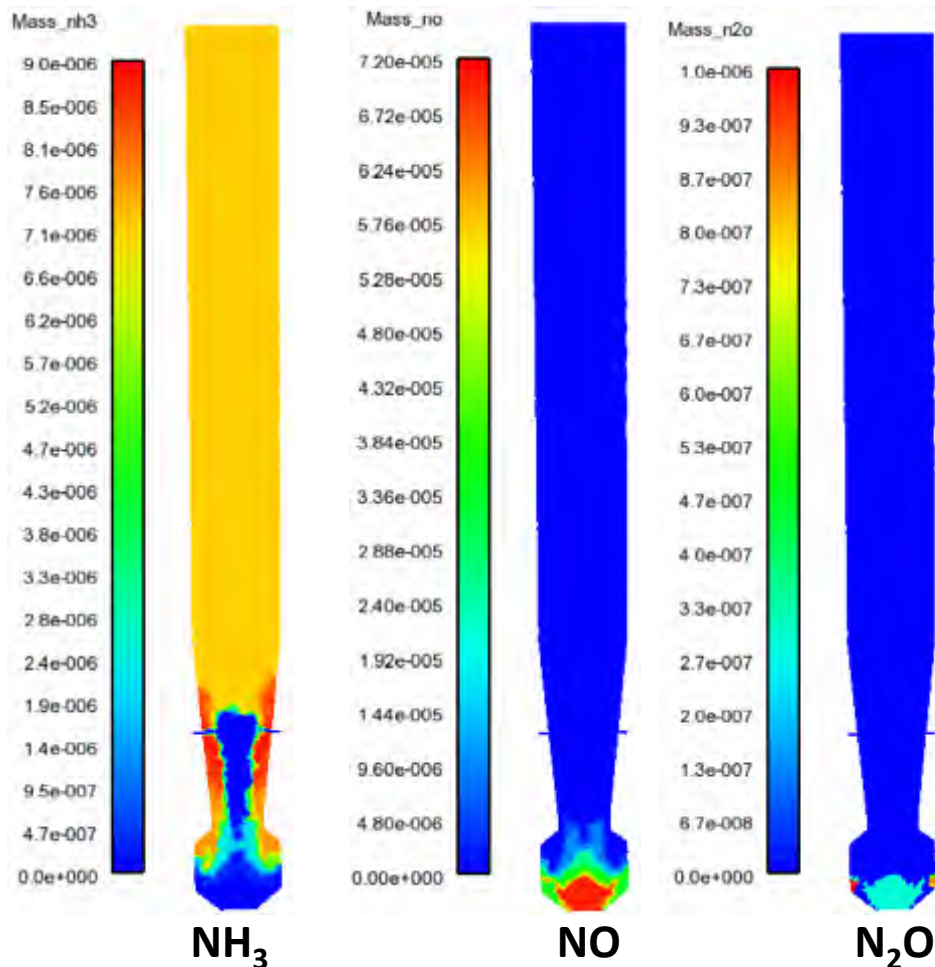


CH₄

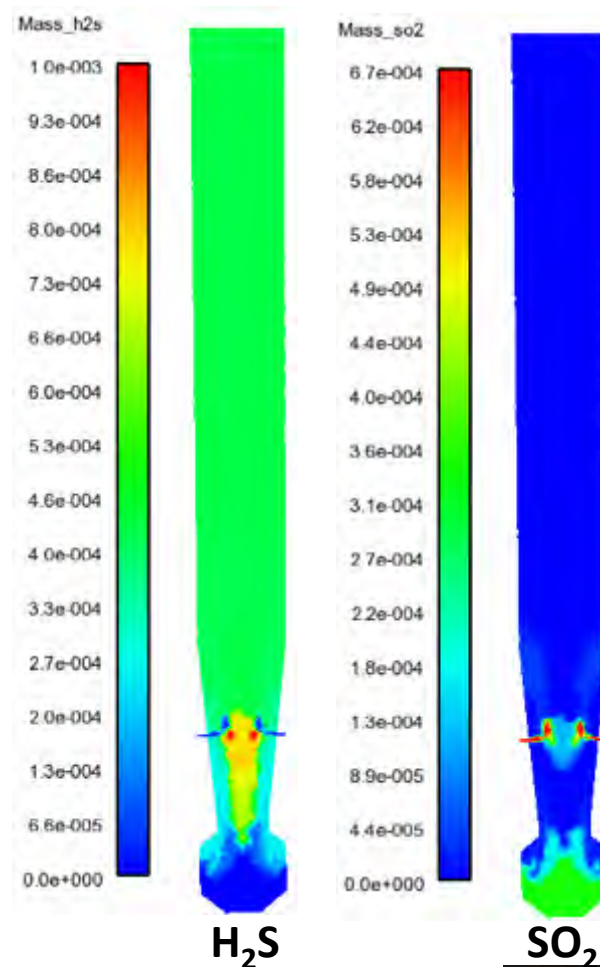


其它组分计算结果

含N的组分



含S的组分



主要产物的浓度结果

组分	Mass Fraction(%)	组分	Mass Fraction(%)
n2	60.51524	a2r5	0.01634857
co	28.61813	a3	0.009171027
co2	5.612521	a4	0.005306232
ch4	1.247429	cos	0.004966189
h2	1.20442	c6h5ch3	0.004142797
h2o	0.9442694	c12h10	0.003463189
char.s	0.9203736	c*occ*o	0.002171601
c6h6	0.7537315	c2h4	0.00157221
flrnthn	0.08320883	c2h6	0.001062194
h2s	0.04299146	nh3	0.000718618

总结

- 成熟的FLUENT求解器结合先进的Energico求解器，可以对复杂的工业反应器进行高精度模拟。
- 采用组分输运模型，结合多步char反应，对煤粉气化过程进行了数值模拟，结果表明：数值计算可以较好的预测温度分布和合成气的浓度分布。
- 利用降阶方法，结合复杂反应机理，在三维计算结果的基础上对气化炉的复杂成分进行精确模拟，得到了高精度的详细结果。
 - NO_x、NH_x和SO_x的预测
 - PAH增长
- 高精度仿真需要与一定的工程经验相结合，才能得到高精度的计算结果
- 汉泰科技多年来致力于复杂燃烧/流动仿真，积累了宝贵的经验，希望未来能与广大客户携手合作

ANSYS



仿真
新时代

2017 ANSYS用户技术大会

中国·烟台

极致仿真
卓越设计

感谢聆听



ANSYS-China