

基于化学动力学的生物质颗粒燃烧排放NO特性模拟与验证

刘婷洁,张学敏,林超群,李俊韬

(中国农业大学工学院,北京100083)

摘要:为研究生物质颗粒燃料燃烧NO排放规律及其生成机理,采用CFD和ChemKin联合仿真,建立试验锅炉燃烧 筒CFD网络模型,应用ChemKin接口导入简化的17组分58基元反应机理,建立ChemKin-

PSR反应模拟网络,选用Reaction DesignC2_NOx详细机理,对棉秆、玉米秸秆、木质3种生物质颗粒NO排放进行模拟。结果表明,NO生成量:棉秆>玉米秸秆>木质;NO排放量随过量空气系数的增加先增大后减小,在过量空气系数为1.7附近达到峰值。将模拟结果与试验结果进行比较,证明了模型和化学反应机理的正确性,为生物质燃料燃烧NO排放的预测与控制提供参考。

0引言

点。

生物质能源因其对CO 2 零贡献,且挥发分较煤高,N、S、灰分和固定炭含量较 煤低^[1],作为替代化石燃料的可持续能源,其应用日益广泛^[2-7] 。但其巨大消耗量也会导致NO的排放剧增^[8] 。NO会伤害人的呼吸器官,造成酸雨,破坏臭氧层等。因此,针对生物质颗粒燃料的NO排放特性愈发成为研究热

国内外对生物质燃料NO排放试验研究工作开展较多,赵欣等[9]在生物质燃烧试验平台上研究了3种生物质固体燃料在不同负荷和进气量下燃烧的NO排放,结果发现,NO的排放量随负荷增加而增加,随进气量增加而减少。Lunbo Duan等^[10]

^[11],张鹤丰^[12],Maryori Díaz-Ramírez^[13],Murari MohonRoy^[14],Evelyn Cardozo^[15],Gerhard Stubenberger^[16],Takero Nakahara^[17] 等均针对不同生物质燃料NO排放进行了试验研究,然而试验研究花费大、周期长,且不能直接解释NO生成机理, 因此,采用数值模拟方法研究生物质燃料燃烧NO排放规律及其生成机理显得十分必要^[18]。

国内外有关燃料燃烧过程中NO转化机理的研究比较广 泛^[19-25]

,而针对生物质燃料燃烧的并不多。本文采用CFD和ChemKin联合仿真,对生物质颗粒燃料NO排放特性和机理进行研究。ChemKin是由美国Sandia国家实验室开发的大型气相化学反应动力学软件,是燃烧领域普遍使用的模拟计算工 具[26]。本文首先对所选燃烧器在Fluent中进行网络建模,结合化学反应机理得到燃烧器温度场和气流速度场,然后 根据相关参数在ChemKin中建立适当的反应器网络模型,对3种生物质颗粒燃料燃烧的气相反应进行模拟仿真,得到 NO的排放规律,并用试验结果加以验证。

1模型建立

1.1Fluent建模及网格划分

本文所采用的试验装置如图1所示,燃料器选用Pellet Biocontrol20型生物质燃料器。



来源:新能源网 china-nengyuan.com



1.进水管 2.锅炉 3.燃烧器 4.进料机构 5.料仓 6.出水管 7.排烟管道 8.烟气/烟尘采样孔

1. Inlet pipe 2. Boiler 3. Burner 4. Feeding mechanism 5. Silo 6. Outlet pipe 7. Exhaust pipe 8. Fume/dust sampling openings

图1 试验装置

Fig.1 Test unit

试验所用燃烧器是一种顶置喂料式成型颗粒燃烧器,其额定燃烧功率在木质燃料工质下标定为20kW(满载),通过 风机来控制配风量。试验中采用木质颗粒、玉米秸秆颗粒、棉秆颗粒3种燃料。表1为3种生物质的挥发分组分的摩尔 (体积)分数^[27]

³/h^[28]。各燃料工业分析、每千克各燃料完全燃烧所需的理论空气量TAV(theoretical air volume)和理论烟气量如表2所示,具体计算可参考文献[29]。

表 1	生物质挥发分组分	

Table 1	Biomass volatile components					
生物质 Biomass	H_2	CH_4	C_2H_4	C_2H_6	CO_2	СО
棉秆 Cotton stalk/%	35	9.5	3.7	0.1	23.7	28
玉米秸秆 Corn straw/%	24.2	16.2	5.4	0.5	19.3	34.4
木质 Wood/%	17.3	15.7	7	0.3	9.6	50

注: 数据来源文献[27]。

Note: Data were cited from reference[27].

表 2 3 种燃料的理论烟气量

	Table	2 In	eoretic	cal flu	e gas o	of three fue	IS
						空气量	理论烟气量
生物质	C-1/%	H/%	0/%	N/%	S.1%	Theoretical	Theoretical
Biomass	Cad /0	1190, 10	Cady / 0	r age / o	5ag/ 70	air volume/	flue gas
						(m ³ ·kg ⁻¹)	volume/(N·m ²)
木质 Wood	49.35	7.98	33.75	0.13	0.42	5.38	5.73
玉米秸秆	40.47	7.00	32.18	0.92	0.43	4.39	4.76
Corn straw							
桶杆 Catton stalls	40.77	7.04	33.58	1.16	0.50	4.38	4.77
Cotton stark							

利用Fluent对燃烧筒结构进行三维建模、网格划分(如图2所示)及边界条件设置。在Mesh中划分三维模型的网格时,对流体区域分别选择四面体和六面体混合网格,通过Sweep、Patch、Conforming、Sizing、Inflation等方法来进行划分;在结构细小处,对网格进行加密以获得较好的网格质量。最终网格数为362782,节点数为65584,平均网格畸变度为0.233,最大网格畸变度为0.81,网格质量较好。求解设置EDC涡耗散有限速率化学反应模型,使用详细阿累尼乌斯化学动力学机理,燃烧过程湍流模拟采用Reynolds平均法(RANS)k-双方程模型。组分输运模型选用species transport,该模型可以由用户自定义反应机理。



图 2 燃烧筒网格划分示意图

Fig.2 Combustion cylinder mesh division schematic

1.2 NOx化学机理的选取

NO _x详细排放机理选用ChemKin中Reaction Design发展的的C2_NO_x机理。C2_NO_x



链接:www.china-nengyuan.com/tech/107799.html

来源:新能源网 china-nengyuan.com

压力相关机理 包括99个反应组分和694个 基元反应,在较宽反应域下详细描述了碳氢化合物的 氧化和NO_x 的机理。应用于CFD计算的化学反应机理要进行大量的简化,反应机理的简化要求对于给定的精度保证描述燃烧准确 性,省略对燃烧过程没有明显影响的组分和基元反应,减少仿真运算量,因此采用敏感性分析法简化得到17组分58基

元反应机理(见表3)。



链接:www.china-nengyuan.com/tech/107799.html

来源:新能源网 china-nengyuan.com

表 3 17 组分 58 基元反应机理

Table 3 17 components and 58 primitive reactions mechanism

$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	序号	反应式	指前因子	温度指数	活化能
10. Chember equation factor exponent energy 1 CH ₄ +H+H+H ₂ 8.00E+26 -3 0 2 CH ₄ +O ₂ -CH ₄ +H ₁₀₂ 7.90E+13 0 56 00 3 CH ₄ +O=CH ₄ +H ₂ 2.02E+04 3 8.750 4 CH ₄ +O=CH ₄ +H ₂ 1.60E+06 2.1 2.460 6 CH ₄ +O=CH ₄ +H ₂ O 1.60E+06 2.1 2.460 6 CH ₄ +O=CH ₄ +H ₂ O 1.00E+13 0 0 7 CH ₄ +O=CH ₄ +H ₂ O 1.50E+13 0 0 12 CH ₂ +OH=CH ₄ H ₂ O 2.50E+13 0 0 12 CH ₂ +OH=CH ₄ H ₂ O 3.00E+13 0 0 0 14 CH+O=CO+H 3.00E+13 0 0 0 0 15 CH+OH=HCO+H 3.00E+13 0 0 0 0 16 CH ₂ +O ₂ -CH ₂ +O+O 1.00E+11 0 1.000 0 0 16 CH ₂ +O ₂ -CH ₂ +H ₂ +O <td>No</td> <td>Chamical equation</td> <td>Pre-exponential</td> <td>Temperature</td> <td>Activation</td>	No	Chamical equation	Pre-exponential	Temperature	Activation
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	INO.	Chemical equation	factor	exponent	energy
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1	CH3+H+M=CH4+M	8.00E+26	-3	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	2	CH4+O2=CH3+HO2	7.90E+13	0	56 000
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	3	CH4+H=CH2+H2	2.20E+04	3	8 750
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	4	CH ₄ +O=CH ₂ +OH	1.60E+06	24	7 400
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	5	CH ₄ +OH=CH ₃ +H ₂ O	1.60E+06	2.1	2 460
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	6	CH+O=CHO+H	6.80E+13	0	2 400
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	7	$CH_{+}OH=CH_{+}O+H_{-}$	1.00E+12	0	0
a Charden-Lip-Higher 1.00E-113 0 15 100 9 CH ₂ +H=CH ₂ +H ₂ 1.40E+19 -2 0 11 CH ₂ +OH=CH ₂ +O ₁ +H 2.50E+13 0 0 12 CH ₄ +OH=CH ₂ +H ₂ O 4.50E+13 0 0 13 CH+O=CO+H 5.70E+13 0 0 14 CH+O=CO+H 5.70E+13 0 0 15 CH+OH=HCO+H 3.00E+13 0 0 16 CH+CO ₂ =HCO+CO 3.40E+12 0 1000 17 CH ₂ +O=CO+H+H 3.00E+13 0 0 0 10 CH ₂ +O=CO+H ₂ 5.00E+13 0 9.000 2 11 CH ₂ +O ₂ =CO ₂ +H ₂ 6.90E+11 0 -500 2 CH ₂ +O ₂ =CO ₂ +H ₂ 6.90E+11 0 -500 22 CH ₂ +O ₂ =HCO+OH 4.30E+10 0 -500 2 6.447+O ₂ =CO ₂ +H ₂ 1.90E+10 0 -500 25 CH ₂ +O ₂ =HCO+OH 4.30E+10	0	$CH_{3}+OH=CH_{2}O+H_{2}$	1.50E+12	0	5 000
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	0	$CH_{+}H=CH_{+}H_{2}O$	1.50E+15 0.00E+12	0	15 100
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	10	$CH_3+H=CH_2+H_2$	9.00E+15	0	15 100
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	10	$CH_2+H-CH+H_2$	1.40E+19	-2	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	11	$CH_2+OH-CH_2O+H$	2.50E+15	0	2 000
13 CH+O=CO+H 5.70E+13 0 0 14 CH+O=CO+H 3.00E+13 0 0 15 CH+O=HCO+H 3.00E+13 0 0 16 CH+CO_2=HCO+CO 3.40E+12 0 690 17 CH_2+CO_2=CH_20+CO 1.10E+11 0 1000 18 CH_2+O=CO+H+H 3.00E+13 0 0 20 CH_2+O_2=CO_2+H+H 1.60E+12 0 0 1000 21 CH_2+O_2=CO_2+H+H 1.60E+13 0 9000 22 CH_2+O_2=CO+H+H 8.60E+10 0 -500 23 CH_2+O_2=CO+H+H 8.60E+10 0 -500 24 CH_2+O_2=CO+OH 4.30E+10 0 -500 25 CH_2+O_2=HO+OH 4.30E+10 0 -500 26 CH_2O+H=HCO+H_2 2.19E+08 1.8 3 000 28 CH_2O+H=HCO+H_2 2.19E+08 1.8 3 000 29 CH_2O+O=HO+O+H 3.3E+16 0 0 0 31 HCO+O=CO+H_2O 3.00E+13 0	12	$CH_2+OH=CH+H_2O$	4.50E+13	0	3 000
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	13	CH+O ₂ =HCO+O	3.30E+13	0	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	14	CH+O=CO+H	5.70E+13	0	0
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	15	CH+OH=HCO+H	3.00E+13	0	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	16	CH+CO ₂ =HCO+CO	3.40E+12	0	690
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	17	CH ₂ +CO ₂ =CH ₂ O+CO	1.10E+11	0	1 000
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	18	CH ₂ +O=CO+H+H	3.00E+13	0	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	19	$CH_2+O=CO+H_2$	5.00E+13	0	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	20	CH ₂ +O ₂ =CO ₂ +H+H	1.60E+12	0	1 000
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	21	CH ₂ +O ₂ =CH ₂ O+O	5.00E+13	0	9 000
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	22	CH ₂ +O ₂ =CO ₂ +H ₂	6.90E+11	0	500
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	23	CH2+O2=CO+H2O	1.90E+10	0	-1 000
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	24	CH2+O2=CO+OH+H	8.60E+10	0	-500
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	25	CH2+O2=HCO+OH	4.30E+10	0	-500
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	26	CH ₂ O+OH=HCO+H ₂ O	3.43E+09	1.2	-447
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	27	CH ₂ O+H=HCO+H ₂	2.19E+08	1.8	3 000
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	28	CH ₂ O+M=HCO+H+M	3.31E+16	0	81 000
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	29	CH ₂ O+O=HCO+OH	1.81E+13	0	3 082
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	30	HCO+OH=CO+H_O	5.00E+12	õ	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	31	HCO+M=H+CO+M	1.60E + 12	õ	14 700
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	32	HCO+H=CO+H	4.00E+13	õ	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	33	HCO+O=CO+H	1.00E + 13	0	0
34 InCoro_2-H02+CO 3.50E+13 0.44 -4 200 35 CO+O+H=CO2+H 1.51E+07 1.3 -758 37 CO+O2=CO2+O 1.60E+13 0 41 000 38 HO2+CO=CO2+OH 5.80E+13 0 22 934 39 H2+O2=2OH 1.7E+13 0 47 780 40 OH+H2=H2O+H 1.17E+09 1.3 3 626 41 H+O2=OH+O 5.13E+16 -0.8 16 507 42 O+H2=OH+H 1.80E+10 1 8 826 43 H+O2+M=HO2+M 3.61E+17 -0.7 0 H2O Enhanced 1.86E+01 0 0 CO2 Enhanced 2.86E+00 0 0 H2O Enhanced 2.11E+00 0 0 M2 Enhanced 1.26E+00 0 0 44 OH+HO2=H2O+O2 7.50E+12 0 0 0 45 H+HO2=O2+OH 1.40E+13 0 1.073 0 1.073 47 2OH=O+H2O 6.00E+08 1.3	34	HCO+O=HO+CO	2 20E+12	-0.4	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	25	CO+O+M=CO+M	3.30E+13	-0.4	-4 200
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	35	CO+OH=CO+H	1.51E+07	1.2	-4 200
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	27	$CO+OH=CO_2+H$	1.51E+07	1.5	-/38
38 HO ₂ +CO=CO ₂ +OH $3.80E+13$ 0 22.934 39 H ₂ +O ₂ =2OH $1.70E+13$ 0 47.780 40 OH+H ₂ =H ₂ O+H $1.17E+09$ 1.3 3.626 41 H+O ₂ =OH+O $5.13E+16$ -0.8 16.507 42 O+H ₂ =OH+H $1.80E+10$ 1 8.826 43 H+O ₂ +M=HO ₂ +M $3.61E+17$ -0.7 0 H ₂ O Enhanced $1.86E+01$ 0.77 0.7 M_2 O Enhanced $2.86E+00$ 0.72 $0.750E+12$ 0.70 0.733 44 OH+HO ₂ =H ₂ O+O ₂ $7.50E+12$ 0.733 0.1073 46 O+HO ₂ =O ₂ +OH $1.40E+13$ 0.1073 0.1073 47 $2OH=O+H_2O$ $6.00E+08$ 1.3 0.1073 48 H+H+M=H ₂ +M $1.00E+18$ -1 0.1073 49 H+H+H ₂ =H ₂ +H ₂ $9.20E+16$ -0.6 $0.20E+10$ 50 H+H+H ₂ =H ₂ +H ₂ $9.20E+16$ -0.6 $0.20E+10$ $0.6E+22$ -2.0 $0.6E+22$ <td>37</td> <td>$U_{0+0_2=C_2+0}$</td> <td>1.00E+13</td> <td>0</td> <td>41 000</td>	37	$U_{0+0_2=C_2+0}$	1.00E+13	0	41 000
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	38	$HO_2+CO=CO_2+OH$	5.80E+15	0	22 934
40 $OH+H_2=H_2O+H$ $1.1/E+09$ 1.3 $3 626$ 41 $H+O_2=OH+O$ $5.13E+16$ -0.8 $16 507$ 42 $O+H_2=OH+H$ $1.80E+10$ 1 $8 826$ 43 $H+O_2+M=HO_2+M$ $3.61E+17$ 0.7 0 H_2O Enhanced $1.86E+01$ 0.7 0 H_2 Enhanced $2.86E+00$ 0.7 0.7 H_2 Enhanced $2.11E+00$ 0.7 0.7 H_2 Enhanced $2.12E+00$ 0.7 0.7 44 $OH+HO_2=H_2O+O_2$ $7.50E+12$ 0 0.7 45 $H+HO_2=2OH$ $1.40E+13$ 0 1.073 46 $O+HO_2=O_2+OH$ $1.40E+13$ 0 1.073 47 $2OH=O+H_2O$ $6.00E+08$ 1.3 0 48 $H+H+M=H_2+M$ $1.00E+18$ -1 0 49 $H+H+H_2=H_2+H_2$ $9.20E+16$ -0.6 0 51 $H+H+M=0=H_2+M$ $1.60E+22$ -2 0 0	39	$H_2 + O_2 = 2OH$	1.70E+13	0	47 780
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	40	$OH+H_2=H_2O+H$	1.17E+09	1.3	3 626
42 $O+H_2=OH+H$ 1.80E+10 1 8 826 43 $H+O_2+M=HO_2+M$ 3.61E+17 -0.7 0 H_2O Enhanced 1.86E+01 0 CO_2 Enhanced 4.20E+00 0 H_2 Enhanced 2.86E+00 0 CO Enhanced 2.11E+00 0 N_2 Enhanced 1.26E+00 44 $OH+HO_2=H_2O+O_2$ 7.50E+12 0 0 45 $H+HO_2=2OH$ 1.40E+13 0 1.073 46 $O+HO_2=O_2+OH$ 1.40E+13 0 1.073 47 2OH=O+H_2O 6.00E+08 1.3 0 48 $H+H+M=H_2+M$ 1.00E+18 -1 0 49 $H+H+H_2=H_2+H_2$ 9.20E+16 -0.6 0 50 $H+H+H_2=H_2+H_2$ 9.20E+16 -0.6 0 51 $H+H+Q_2=H_2+O_2$ 5.49E+20 -2 0 52 $H+OH+M=H_2O+M$ 1.60E+22 -2 0 53 $H+O+M=OH+M$ 6.20E+16 -0.6 0	41	H+O ₂ =OH+O	5.13E+16	-0.8	16 507
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	42	O+H ₂ =OH+H	1.80E+10	1	8 826
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	43	H+O ₂ +M=HO ₂ +M	3.61E+17	-0.7	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		H ₂ O	Enhanced	1.86E+01	
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		CO_2	Enhanced	4.20E+00	
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		H_2	Enhanced	2.86E+00	
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		CO	Enhanced	2.11E+00	
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		N_2	Enhanced	1.26E+00	
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	44	OH+HO ₂ =H ₂ O+O ₂	7.50E+12	0	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	45	H+HO ₂ =2OH	1.40E+14	0	1 073
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	46	O+HO2=O2+OH	1.40E+13	0	1 073
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	47	2OH=O+H ₂ O	6.00E+08	1.3	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	48	H+H+M=H ₂ +M	1.00E+18	-1	0
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	49	H+H+H2=H2+H2	9.20E+16	-0.6	0
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	50	H+H+H2O=H2+H2O	6.00E+19	-1.2	0
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	51	H+H+CO ₂ =H ₂ +CO ₂	5.49E+20	-2	0
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	52	H+OH+M=H2O+M	1.60E+22	-2	0
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		H ₂ O	Enhanced	5.00E+00	
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	53	H+O+M=OH+M	6.20E+16	-0.6	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		H ₂ O	Enhanced	5.00E+00	1
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	54	$H+HO_2=H_2+O_2$	1.25E+13	0	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	55	$HO_2 + HO_2 = H_2O_2 + O_2$	2.00E+12	0	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	56	$H_2O_2+M=OH+OH+M$	1.30E+17	0	45 500
$58 H_2O_2+OH=H_2O+HO_2 = 1.00E+12 = 0 = 3.800$	57	H ₂ O ₂ +H=HO ₂ +H ₂	1.60E+12	0	3 800
	58	$H_2O_2+OH=H_2O+HO_2$	1.00E+13	ő	1 800



应用ChemKin接口将17组分骨架机理导入Fluent中,得到玉米秸秆在入口气流速度为6m/s时温度场的模拟结果如图3 所示。



图 3 Fluent 模拟温度场云图

Fig.3 Temperature field cloud picture simulated by Fluent

图3表明整个温度场

最高温度为1320K,略高于试验测得燃烧器 出口的炉膛测试平均温度1293K^[28]

,但在可接受范围内,这与模型假设中忽略固定碳气化等吸热反应过程的模型设置有关。图中所示的温度场分布与实际情况相符,高温区主要集中于火帽下方火焰峰面,这是因为火帽的存在使得该处的压力较大,同时会产生的回流也会使局部温度较高。将ChemKin中的反应机理导入Fluent中,求解计算得到的模拟结果在一定程度上体现了真实的燃烧情形。

1.3 ChemKin网络模拟仿真

通过DSMOKE模块导出CFD仿真结果的混合区体积和滞留时间参数,依据Fluent仿真得到的结果,将参数输入到ChemKin参数设置表中,作为机理反应模型的初始条件,具体参数见表4所示。问题类型选用Constrain Pressure and Solve Energy Equation (Default),化学当量比为1.0、压力为1atm、温度为1400K。在ChemKin中建立简化的理想均相反应器网络,整个网络结构如图所示。

图中共有6个PSR(perfectly stirred reactor)反应器,编号为1~6,1个一维柱塞流反应器PFR(plug flow reactor)用来 模拟排气管道。反应器1到6分别对应于燃烧筒的6个反应区域,如图4b所示,反应器1为入口区域,反应器2为固相混 合区,反应器3为气相混合区域,反应器4为火帽上方燃烧区域,反应器5为火帽下方回流区域,反应器6为燃烧筒出口 及其后方区域。



链接:www.china-nengyuan.com/tech/107799.html 来源:新能源网 china-nengyuan.com



图 4 反应器网络结构图 Fig.4 Reactor network structure

2模拟结果分析

2.1各反应器的NO分布

图5a为在4kg/h进料速度、过量空气系数 =1.5(25m³/h)下的玉米秸秆组分输入,各PSR反应器的CO、O₂、CO₂ 组分摩尔分数 分布。O2含量在反应器1、2 、3中一直处于高浓度水平,因为这些区域燃烧并不剧烈 ,O₂ 消耗量较少,在区域3以后,燃烧反应充分, O2含量迅速下降,同时CO₂ 量迅速增加,此时CO生成量在反应器中降到最低点。CO₂和O₂随后保持水平,达到动态平衡,是燃烧稳定的区域。

反应器网络NO的含量变化如图5b所示。在反应器1到3中,燃烧温度较低,气体挥发分的滞留时间较短,所以生成的NO量很少;而反应器4以后,燃烧充分,温度升高,O2 被大量的消耗,使得NO浓度大幅度上升,但因为温度低于1500K,即热力型NO的生成条件,又由于快速型NO的权 重在3种NO中较低,所以此时主要是O2 与生物质燃料中的N元素发生氧化反应生成燃料型NO。从该曲线图中可以很好的预测NO生成的主要区域,为提出降低NO的措施提供了理论的依据。





图 5 各反应器中 CO、O₂、CO₂、NO 的浓度分布 Fig.5 CO, O₂, CO₂, NO mole fraction of each reactor

2.2不同燃料的NO排放对比

对玉米秸秆、棉 秆颗粒燃料在进料量为4kg/h、风量25 m3/h、过量空气系数为1.5,木质风量30m³ /h、过量空气系数为1.4三种工况下燃烧,对模拟烟气管道PFR反应器中NO排放模拟结果处理,得到的结果如图6所示 。

对比3种颗粒燃料可以发现,木质燃料NO达到峰值的距离最短,速度最快,而棉秆最慢。在生成量方面,因为燃烧 温度都在1500K以下,且空气量充足,所以生成的NO主要是燃料型NO,3种颗粒燃料的N元素含量由高到低以此为棉 秆、玉米秸秆、木质颗粒,因此棉秆的生成量大于玉米秸秆大于木质颗粒。三者的工业分析数据显示,棉秆和玉米秸 秆的灰分量较高^[27]

,导致其NO达到峰值速度相对较慢,但从生成量的变化量上来看,三者增值仅为5e-6左右,并不明显。



链接:www.china-nengyuan.com/tech/107799.html 来源:新能源网 china-nengyuan.com



注: λ 为过量空气系数。

Note: λ is excess air coefficient.

图 6 3 种生物质颗粒的 NO 排放曲线

Fig.6 NO emissions curve of three biomass pellet fuels

图6的模拟结果与试验结果 [28]

进行对比,如表5所示。对比试验结果数据,其中玉米秸秆和木质的结果较为一致,但棉秆的预测结果有6%的偏差, 这可能同燃料N中具体

的存在形式相关。在挥发分析出的过程中,挥

发分氮主要以HCN和NH₃形式析出,而本文参考Faravellie的研究用HCN替代燃料中的挥发分N。

表 5 3 种生物质颗粒燃料 NO 排放模拟值与试验值对比表

Table 5	Contrast table of simulation value and experiment value
	of three biomass pellet fuels NO emissions

生物质 Biomass	过量空气系数 Excess air coefficient λ	NO 试验值 ^[28] Experiment value/10 ⁻⁶	NO 模拟值 Simulation value/10 ⁻⁶	相对误差 Relative error/%
玉米秸秆 Corn straw	1.5	258	251	2.7
棉秆 Cotton stalk	1.5	350	329	6.0
木质 Wood	1.4	96	98	2.1

由表5可知,在相同的燃烧器负荷和相同空气流速下3种燃料的NO平均排放值可以发现,木质颗粒的NO排放最低, 棉秆颗粒的最高,玉米秸秆颗粒介于二者之间。

这是因为,在14

00K温度下HCN向NO的转化路径是

口国针

china-nengyuan.com

: HCN+M H+CN+M, HCN+OH $CN+H_2$

 $\mathsf{O}, \mathsf{CN+O} \quad \mathsf{NO+C}, \quad \mathsf{HCN+OH} \quad \mathsf{HOCN+H}, \quad \mathsf{HNCO+O}_2 \quad \mathsf{NCO+HO}_2$

、NCO+O NO+CO、HNC+O NH+CO等一系列反应。CO主要通过反应NCO+O NO+CO影响NO生成,从平衡 常数判断,较低的CO浓度可促进反应向正方向进行;H₂主要通过反应H₂+OH H₂

O+H产生H基作用于CH₂

+NO H+HNCO,使得NO的上升; N元素含量高以及高温也会导致高NO生成^[8]

。通过分析棉秆的输入组分,CO相对含量低,H。

相对含量高,在自身元素分析中N的质量分数是三者中最高,而且与玉米秸秆颗粒相比较,棉秆颗粒的燃烧温度1283 K要高于玉米秸秆的燃烧温度1259K,因此棉秆NO的排放量是3种燃料中最高的。

2.3不同风量的NO排放对比

对于玉米秸秆,在4kg/h进料速度的工况下,设置不同的过量空气系数(空气质量流率),范围为1.3~2.0,步长为0.1,得到反应网络系统出口处NO的分布。如图7所示,随着当量比的增加,NO的排放出现较快增长,在过量空气系数1.7附近,模型模拟值出现最高排放,随后NO的排放随过量空气系数的增加开始下降,过量空气系数的变化带来燃料过程中氧浓度的变化,在 1.7前对NO的生成有较明显促进,这之后对NO的影响不显著,同时过量空气的稀释效应一定程度降低了NO的体积分数,但对NO的绝对生成量无贡献。



图 7 NO 排放随空气过量系数变化

Fig.7 NO emissions change with excess air coefficient

将模拟结果与已有试验结果^[28]进行对比,如表 6 所示,对于测定试验数据,模拟结果偏差均不大。

表6	3 种过量空气系数1	NO آ	排放模拟值与试验值对比表
----	------------	------	--------------

Table 6 Contrast table of simulation value and experiment value of NO emissions under three excess air coefficient

过量空气系数 Excess air coefficient λ	NO 试验值 ^[28] Experiment value/10 ⁻⁶	NO 模拟值 Simulation value/10 ⁻⁶	相对误差 Relative error/%
1.5	258	251	2.7
1.7	287	290	1.0
2.0	261	263	0.8

过量空气系数是通过进气量增加而增大的,当 从1.5变为1.7时,燃烧更加充分,O2随进气量而增多;再继续增大进气量,空气流速增加使得混合气体在炉膛内的滞留时间变短,同时对NO有所稀释,因而其浓度降低。

需要说明的是,不管模拟结果或是试验数据NO排放值均较高,这除了与燃料自身性质有关外,燃烧器的结构对其 排放也有很大影响。张永亮^[30]

对包括本文研究的PB-20型燃烧器在内的3种燃烧器排放进行了测试,结果表明本文选用的燃烧器NO结果较高。燃烧 器结构会影响燃烧参数,从而影响排放。利用本文机理结果,可针对不同的燃烧器进行模拟研究其排放,从而大大缩 减燃烧器的设计和改进过程。这部分相关原理和模拟研究应成为今后研究方向。

3结论

1) 根据Fluent对燃烧筒仿真结果在ChemKin中建立了PSR等离子体管流反应器模型,对NO排放的化学过程进行反应动力学模拟。

2)结果显示各反应器NO浓度分布与温度分布和CO、O₂、CO₂ 各组分分布有直接关系,NO主要生成在反应器4之后,且为燃料型NO。

3)将不同生物质成型燃料NO排放的模拟结果与试验结果进行对比,两者得出相同的变化趋势,棉秆成型颗粒的结



果有6%的偏差,玉米秸秆和木质的结果较为符合。

4)不同过量空气系数下的玉米秸秆模拟结果表明:在过量空气系数为1.7附近时,燃烧产生的NO排放最高,体积分数为290×10⁻⁶;模拟结果与试验结果较为吻合。

5)验证了选用ReactionDesign的C2_NO _x 机理进行CFD和ChemKin联合仿真,可实现生物质颗粒燃料NO排放预测,并具有较好的精确性。

[参考文献]

[1]罗娟,侯书林,赵立欣,等.生物质颗粒燃料燃烧设备的研究进展[J].可再生能源,2009,27(12):90-95.

[2]田红,廖正祝.农业生物质燃烧特性及燃烧动力学[J].农业工程学报,2013,29(10):203-212.

[3]张永亮,赵立欣,姚宗路,等.生物质固体成型燃料燃烧颗粒物的数量和质量分布特性[J].农业工程学报,2013,29(19):185-192.

[4] Matti Parikka. Global biomass fuel resources [J]. Biomass and bioenergy, 2004, 27(6): 613 - 620.

[5]陈汉平,李斌,杨海平,等.生物质燃烧技术现状与展望[J].工业锅炉,2009(5):1-7.

[6] Demirbas A.Combustion characteristics of different biomass fuels[J].Progress in Energy and Combustion Science, 2004, 30(2): 219 - 230.

[7]姚宗路,吴同杰,赵立欣,等.生物质成型燃料燃烧挥发性有机物排放特性试验[J].农业机械学报,2015,45(10):135-240.

[8] Williams A, Jones J M, Ma L, et al. Pollutants from the combustion of solid biomass fuels [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2012 (38): 113 - 137.

[9]赵欣,李慧,胡乃涛,等.生物质固体成型燃料燃烧的 NO和 CO 排放研究[J].环境工程,2015,33(10):50-54.

[10]Lunbo Duan, Yuanqiang Duan, Changsui Zhao, et al.NO emission during co-firing coal and biomass in an oxy-fuel circulating fluidized bed combustor[J].Fuel, 2015, 150(15): 8 - 13.

[11] Winter F , Wartha C , Hofbauer H , et al.NO and N2O formation during the combustion of wood , straw , malt waste and peat[J]. Bioresour Technol , 1999 , 70(1): 39 - 49.

[12]张鹤丰.中国农作物秸秆燃烧排放气态、颗粒态污染物排放特征的实验室模拟[D].上海:复旦大学, 2009.

[13] Maryori D í az-Ram í rez , Fernando Sebasti á n , Javier Royo , et al. Influencing factors on NOx emission level during grate conversion of three pelletized energy crops[J]. Appl Energy , 2014 , 115(4): 360 - 373.

[14] Murari Mohon Roy, Kenny W.Corscadden. An experimental study of combustion and emissions of biomass briquettes in a domestic wood stove[J]. Applied Energy, 2012, 99: 206 - 212.

[15]Evelyn Cardozo, Catharina Erlich, Lucio Alejo, et al.Combustion of agricultural residues: An experimental study for small-scale applications[J].Fuel, 2014, 115: 778 - 787.

[16]Gerhard Stubenberger, Robert Scharler, Selma Zahirovic, et al. Experimental investigation of nitrogen species release from different solid biomass fuels as a basis for release models[J]. Fuel, 2008, 87: 793 - 806.

[17] Takero Nakahara, Hui Yan, Hiroyuki Ito.Study on one-dimensional steady combustion of highly densified biomass briquette (bio-coke) in air flow[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2015, 35: 2415 - 2422.



[18] Capucine Dupont , Guillaume Boissonnet , Jean-Marie Seiler. Study about the kinetic processes of biomass steam gasification[J]. Fuel , 2007 , 86: 32 - 40.

[19]徐德厚,周月桂,金旭东,等.O2/CO2气氛下甲烷燃烧中NOx转化过程的CHEMKIN模拟[J].锅炉技术,2015,4 6(3):75-79.

[20]丛晶,周月桂,徐德厚,等.O2/CO2气氛下煤粉燃烧中NOx转化机理的CHEMKIN模拟[J].锅炉技术,2015,46(5):63-67.

[21]赵然,刘豪,胡翰,等.O2/CO2气氛下甲烷火焰中NO均相反应机理研究[J].中国电机工程学报,2009(20):52-59.

[22] Hirotatsu Watanabe , Jun-ichiro Yamamoto , Ken Okazaki , et al.NOx formation and reduction mechanisms in staged O2/CO2combustion[J].Combustion and Flame , 2011 , 158(7):1255 - 1263.

[23]Okazaki K , Ando T.NOx reduction mechanism in coal combustion with recycled CO2 [J]. Energy , 1996 , 22(2):207 - 215.

[24]Zhao Ran, Liu Hao, Hu Han, Zhong Xiaojiao, et al. Experimental and modeling study of NO emission under high CO2concentration[J]. Science China, 2010, 53(12): 3275 - 3283.

[25] Vincent Fichet, Mohamed Kanniche, Pierre Plion, et al. A reactor network model for predicting NOx emissions in gas turbines[J]. Fuel, 2010, 89: 2202 - 2210.

[26]董刚,蒋勇,陈义良,等.大型气相化学动力学软件包CHEMKIN及其在燃烧中的应用[J].火灾科学,2000,9(1):27-33.

[27]Demirbas A.Biorefineries: current activities and future developments energy convers[J].Manage , 2009 , 50(11):2782 - 2801.

[28]赵欣.生物质成型燃料气态排放物特性研究[D].北京:中国农业大学,2015.

[29]李鑫华.生物质颗粒燃料燃烧炉的优化设计[D].北京:北京工业大学,2011.

[30]张永亮.生物质固体成型燃料颗粒物排放特性研究[D].北京:中国农业大学, 2014.

原文地址:<u>http://www.china-nengyuan.com/tech/107799.html</u>