

焦炉煤气燃烧反应动力学机理简化与验证

刘乃聪,孙继昊,赵宁波,李淑英

(哈尔滨工程大学 动力与能源工程学院,黑龙江 哈尔滨 150001)

摘要:为减少焦炉煤气燃烧室数值模拟的计算时长,基于直接关系图法和敏感性分析法对 GRI-Mech 3.0 详细机理进行简化,通过理想反应器计算和二维数值模拟验证简化机理的有效性。结果表明:在较宽的参数范围内(初始温度300~800 K,压力0.1~2 MPa和当量比0.5~1.4),含25组分、134步反应的简化机理可以精确计算焦炉煤气的层流火焰传播速度、点火延迟时间、火焰温度以及中间燃烧组分;得到的简化机理能够有效模拟射流火焰的反应物消耗、产物生成、温度以及中间产物分布等特征,在保证计算精度的前提下,大幅减少了数值模拟的计算时长。

关键词:焦炉煤气;燃烧;反应动力学机理;数值模拟

中图分类号:TK16 文献标识码:A DOI:10.16146/j.cnki.rndlge.2021.11.016

[引用本文格式]刘乃聪,孙继昊,赵宁波,等.焦炉煤气燃烧反应动力学机理简化与验证[J].热能动力工程,2021,36(11):114-119. LIU Nai-cong, SUN Ji-hao, ZHAO Ning-bo, et al. Simplification and verification of combustion reaction kinetics mechanism of coke oven gas[J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and Power, 2021, 36(11):114-119.

Simplification and Verification of Combustion Reaction Kinetics Mechanism of Coke Oven Gas

LIU Nai-cong, SUN Ji-hao, ZHAO Ning-bo, LI Shu-ying

(College of Power and Energy Engineering, Harbin Engineering University, Harbin, China, Post Code:150001)

Abstract: In order to decrease the calculation time of numerical simulation of combustion chamber using coke oven gas (COG), the detailed mechanism of GRI-Mech 3.0 was simplified based on direct relation graph (DRG) and sensitivity analysis (SA) methods. The validity of simplified mechanism was verified via the ideal reactor calculation and 2D numerical simulation. The results show that the simplified mechanism including 25 components and 134 elementary reactions can accurately calculate the laminar flame propagation speed, ignition delay time, flame temperature and the intermediate combustion components of COG in the wider ranges of the initial temperature (300 K to 800 K), pressure (0.1 MPa to 2 MPa) and equivalence ratio (0.5 to 1.4). The achieved simplified mechanism can effectively simulate the characteristics of reactant consumption, product generation, temperature and the intermediate product distribution of the jet flame. On the premise of ensuring the calculation accuracy, the simplified mechanism greatly decreases the calculation time of numerical simulation.

Key words: coke oven gas, combustion, reaction kinetics mechanism, numerical simulation

引 言

焦炉煤气是一种包含 H_2 、 CH_4 、 CO 、 CO_2 和 N_2 等的多组分气体,其热值约为 $17 \sim 19 \text{ MJ/m}^3$,在能源、化工、冶金等领域具有重要的应用价值。近年来,随着节能减排技术的快速发展,如何实现焦炉煤气的合理回收和再利用成为前沿课题^[1]。

作为燃烧室设计的重要手段之一,数值模拟能够大幅降低研发成本、缩短研制周期和减少试验风险。为实现焦炉煤气燃烧过程的精确数值模拟,需要将湍流模型与反应动力学机理进行耦合求解。然而,受焦炉煤气复杂组分的影响,基于详细机理的燃烧室数值模拟面临精度与计算效率相互矛盾的问题。因此,急需开展焦炉煤气详细机理简化研究。

以 CO 、 H_2 、 H_2O 、 CH_4 、 CO_2 多组分气体燃料为研究对象,Zacharias 等人^[2]采用稳态和部分平衡近似法实现了 49 步反应骨架机理的简化处理,发现组分类型、比例等均是影响简化机理精度和适用范围的重要因素。为实现 CH_4 、 CO 和 H_2 、 CO 、 H_2O 燃气轮机燃烧室的高精度快速数值模拟,Slavinskaya 等人^[3]开展了多组分气体燃料的详细机理简化研究,通过分析不同预热温度、压力以及当量比条件下的层流火焰速度,验证了简化机理的合理性。林志勇等人^[4]发展了一套适用于多组分气体燃料的详细机理简化方法,通过敏感性分析删除冗余组分和冗余反应后得到基元反应模型,使用准稳态假设方法简化得到总包反应模型。考虑 CH_4 组分对燃烧过程的影响,李亮等人^[5]以 USC-Mech - II 机理为基础,采用基于误差传递的直接关系图法、敏感性分析法以及奇异摄动法,发展了一种含 21 组分、17 步反应的生物质基合成气简化机理,讨论了 CO 和 H_2 比例对简化机理的影响。

本文针对某工业用焦炉煤气的实际组分特点,开展详细机理简化研究。在此基础上,通过理论计算和数值模拟分析焦炉煤气的典型燃烧特性,验证简化机理的有效性。

1 燃烧反应动力学机理简化

1.1 焦炉煤气组分特性

表 1 给出了研究的焦炉煤气组分及其体积分

数。从表中可以看出,该焦炉煤气的可燃组分主要包括 H_2 、 CH_4 和 CO 等,并且 H_2 的体积分数相对较高。因此,在详细机理简化过程中,需要分析火焰传播速度等参数的变化规律。

根据焦炉煤气的组分特点,选择含 53 组分、325 步反应的 GRI-Mech 3.0 详细机理开展简化研究。

表 1 焦炉煤气组分及体积分数

组分	体积分数/%
H_2	57.12
CH_4	21.99
CO	8.12
N_2	6.75
CO_2	2.87
O_2	1.08
C_2H_4	1.64
C_2H_6	0.43

1.2 机理简化方法与流程

目前,燃烧反应动力学机理简化的常用方法包括直接关系图法^[6-8]、敏感性分析法^[9]、奇异摄动法^[10]等。本文采用直接关系图法和敏感性分析法对 GRI-Mech 3.0 详细机理进行简化,具体的简化流程如图 1 所示。首先,通过图搜索法找到与重要组分相关的组分和路径,基于相关误差去除与重要组分关联较小的组分和基元反应,得到骨架机理;其次,采用敏感性分析法找出对目标参数影响较小的组分和基元反应并予以删除,获得简化机理;最后,对采用详细机理和简化机理计算得到的燃烧特性参数进行对比,直到误差满足要求。基于上述简化流程,得到包含 25 组分、134 步反应的简化机理。

2 燃烧反应动力学简化机理验证

2.1 机理简化方法验证

由于焦炉煤气组分的多样性,目前对于表 1 焦炉煤气基础燃烧特性的研究还非常匮乏。针对这一问题,选择 CH_4 对上述燃烧反应动力学机理和简化方法进行验证。

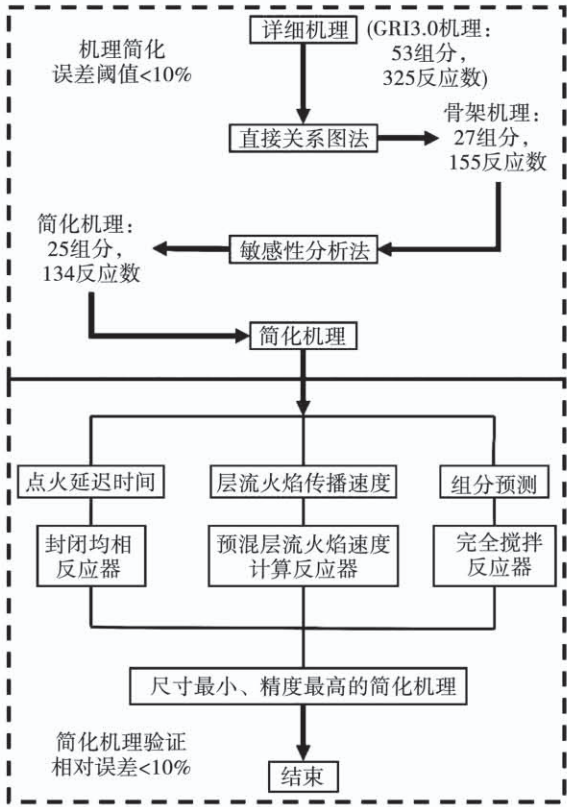


图 1 详细机理简化流程图

Fig.1 Flow chart of the detailed mechanism simplification

图 2 给出了采用 CH_4 简化机理计算得到的层流火焰传播速度变化规律。从图中可以看出,在较宽的的压力和当量比范围内,采用 GRI-Mech 3.0 机理和上述简化方法能够实现 CH_4 层流火焰传播速度的有效预测。

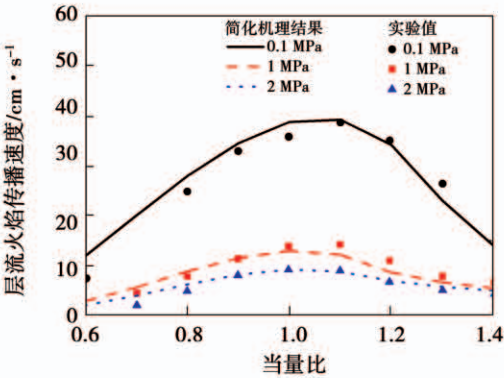


图 2 基于 CH_4 简化机理的层流火焰传播速度
计算结果与实验值对比^[11]

Fig.2 Comparison of the calculated results and experimental values of laminar flame propagation speeds based on CH_4 simplified mechanism^[11]

2.2 理想反应器验证

为验证简化机理的有效性,分别采用预混层流火焰传播速度反应器、封闭式均相反应器以及完全搅拌反应器计算层流火焰传播速度、点火延迟时间、火焰温度以及中间燃烧组分等。其中,初始温度为 300 ~ 800 K,压力为 0.1 ~ 2 MPa,当量比为 0.5 ~ 1.4。

图 3 给出了基于 134 步简化机理与 GRI-Mech 3.0 详细机理的点火延迟时间对比结果。在所研究的初始温度和压力参数范围内,134 步简化机理可以有效实现焦炉煤气点火延迟时间的精确预测。

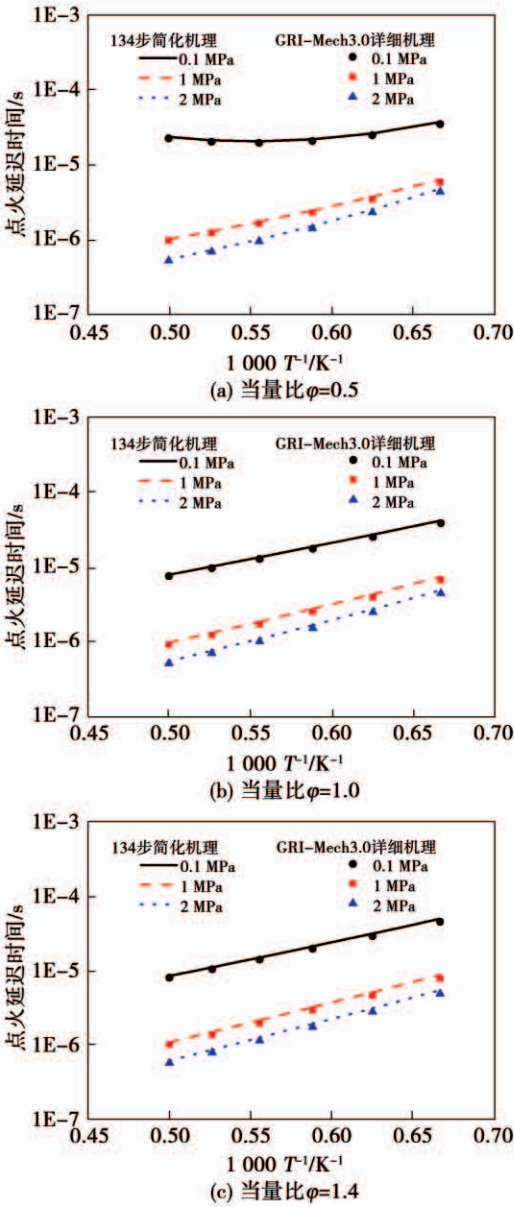


图 3 基于简化和详细机理的点火延迟时间
Fig.3 Ignition delay time based on the simplified and detailed mechanisms

图 4 给出了基于两种机理的焦炉煤气层流火焰传播速度和火焰温度。随着压力和当量比的增加,两种机理的层流火焰传播速度计算误差有所升高,但最大误差小于 10%。产生这一现象的主要原因是,机理简化过程中组分的删减会使导热系数计算出现偏差,压力和当量比越高,导热系数的计算误差越大。

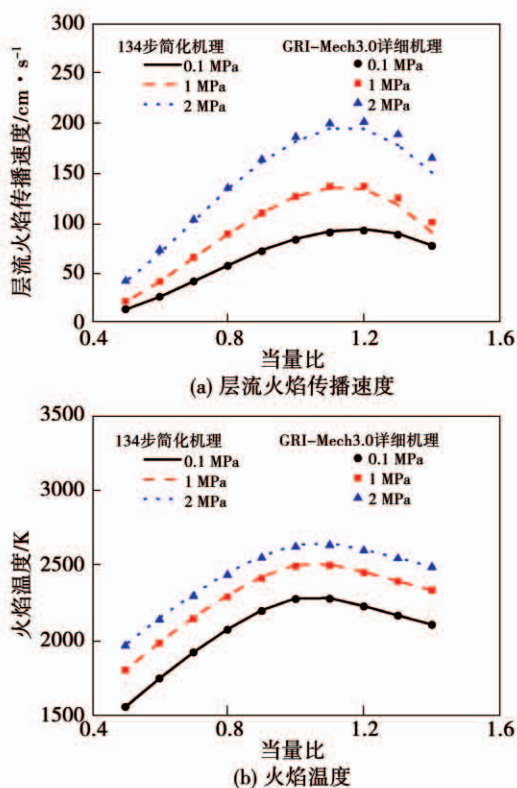


图 4 基于简化和详细机理的层流火焰传播速度与火焰温度

Fig. 4 Laminar flame propagation speeds and flame temperatures based on the simplified and detailed mechanisms

图 5 给出了基于两种机理的焦炉煤气组分变化规律。从图中可以看出,简化机理对 H_2O 、 CO_2 、 O_2 、 CO 、 H_2 和 C_2H_4 的浓度预测较为准确,而对低压、高当量比条件下的 CH_4 浓度预测存在一定误差。另外, C_2H_4 和 C_2H_6 由于浓度低,在反应过程(尤其高压条件)中会很快耗尽。

图 6 给出了基于两种机理的焦炉煤气燃烧过程中间组分变化规律。简化机理与详细机理的结果吻合较好,最大误差小于 10%。

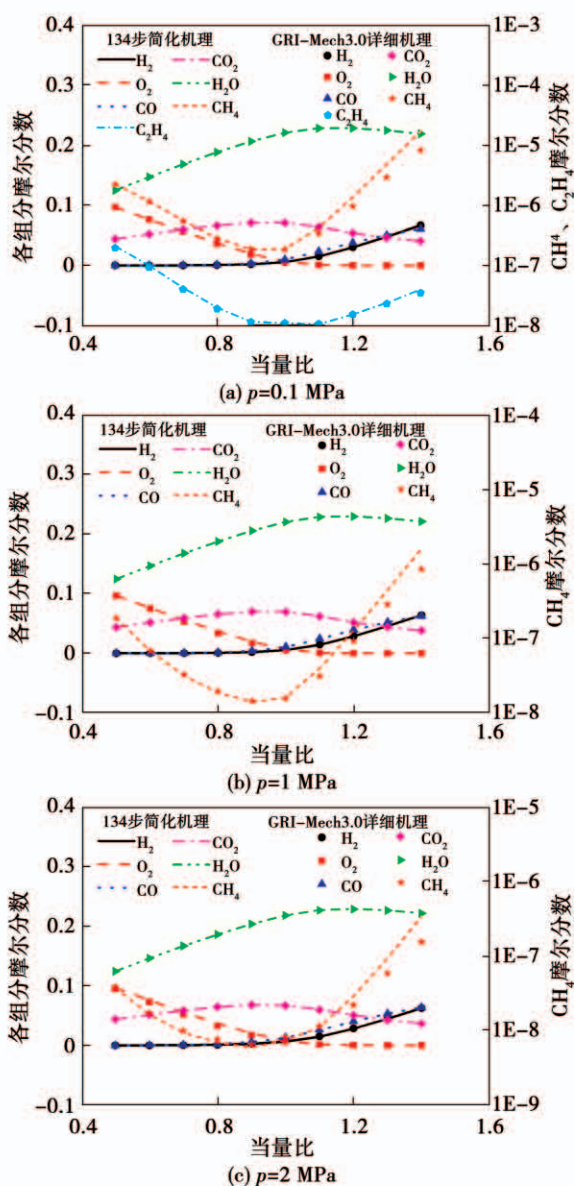


图 5 基于简化和详细机理的反应物与产物浓度
Fig. 5 Concentrations of reactants and products based on the simplified and detailed mechanisms

2.3 二维数值模拟验证

为进一步验证 134 步简化机理的有效性,采用网格数量 15 000 的 Sandia Flame D^[12] 二维模型进行数值模拟验证,如图 7 所示。其中,选择 Standard $k-\varepsilon$ 湍流模型和 EDC 化学反应燃烧模型^[13],射流入口速度为 49.6 m/s,值班入口速度为 11.4 m/s,伴流空气速度为 0.9 m/s。

图 8 给出了以 CH_4 为燃料,基于 GRI-Mech 3.0 详细机理的数值模拟与实验对比结果。其中,喷嘴相对距离指喷嘴距离与喷嘴直径的比值。采用上述数值模拟方法能够相对准确地计算得到射流火焰不同位置处的组分和温度分布。

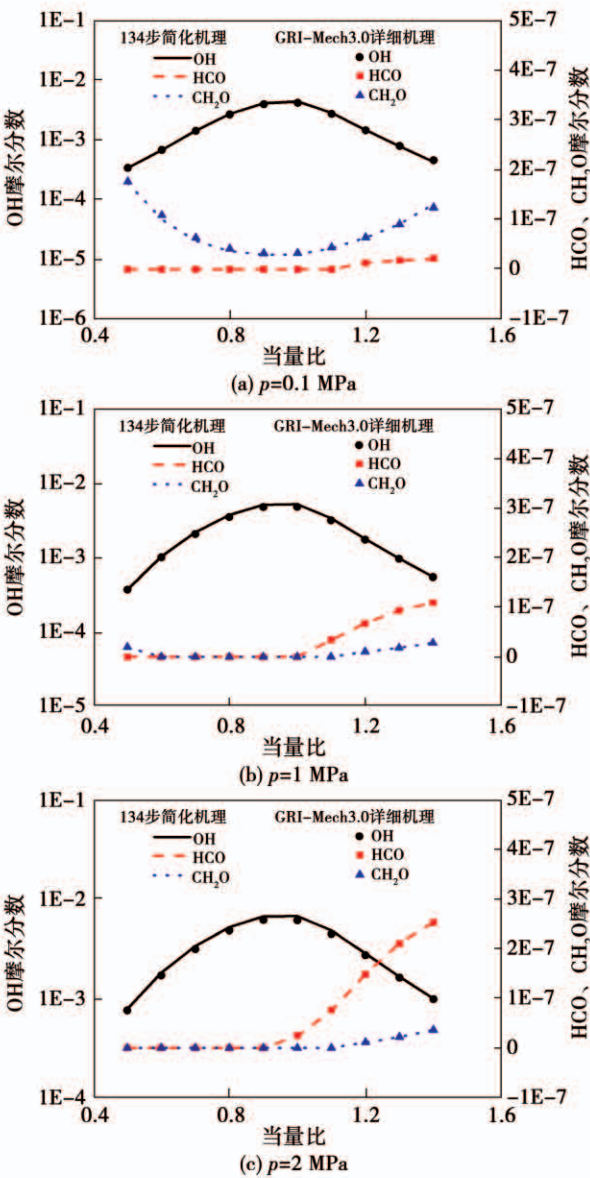


图 6 基于简化和详细机理的中间产物浓度
Fig.6 Concentrations of intermediate products based on using the simplified and detailed mechanisms

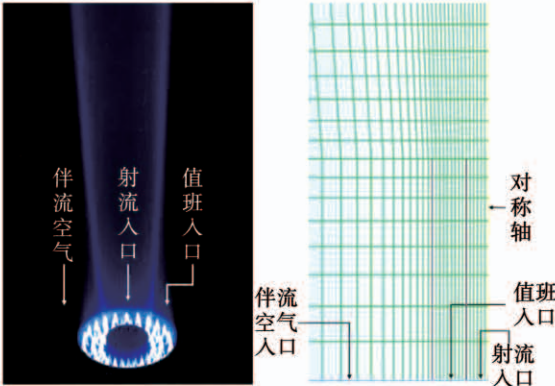


图 7 Sandia Flame D 与结构化数值模拟网格
Fig.7 Sandia Flame D and the structural numerical simulation grid

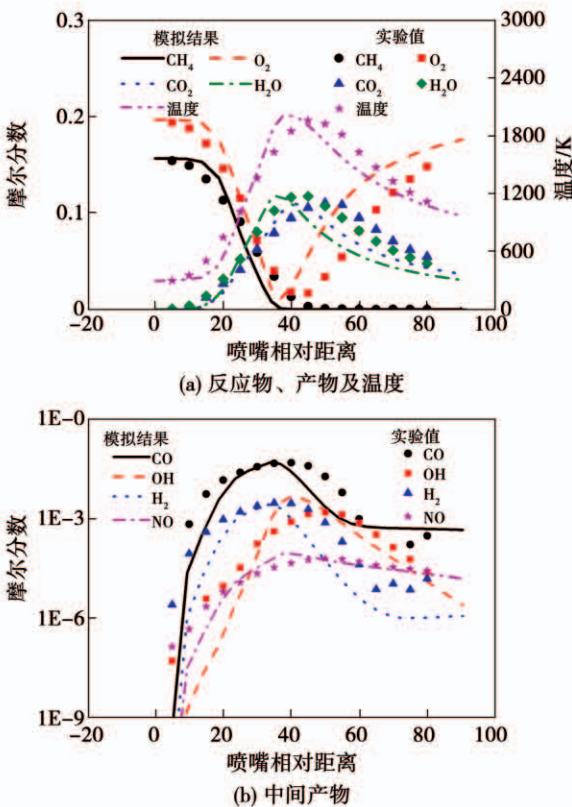


图 8 CH_4 数值结果与实验值^[12]
Fig. 8 Numerical results and experimental values for CH_4 ^[12]

在此基础上,图 9 给出了焦炉煤气简化和详细机理条件下的射流火焰温度分布。采用 25 组分、134 步反应简化机理可以准确数值模拟得到与 GRI-Mech 3.0 详细机理一致的火焰温度分布。

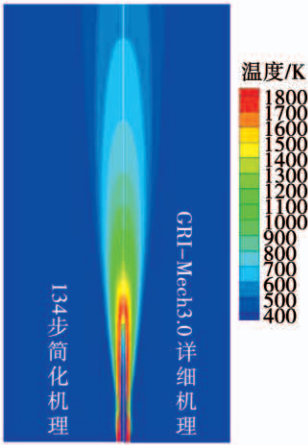


图 9 基于简化和详细机理的焦炉煤气射流火焰温度场
Fig.9 Jet flame temperature field of coke oven gas based on the simplified and detailed mechanisms

图 10 给出了焦炉煤气射流火焰的相关参数变化。从图中可以看出,在所研究的数值模拟条件下,简化机理能够有效预测焦炉煤气燃烧反应重要中间产物 OH、HCO 和 CH₂O 的分布规律,和 GRI-Mech 3.0 详细机理得到的数值模拟结果吻合较好。

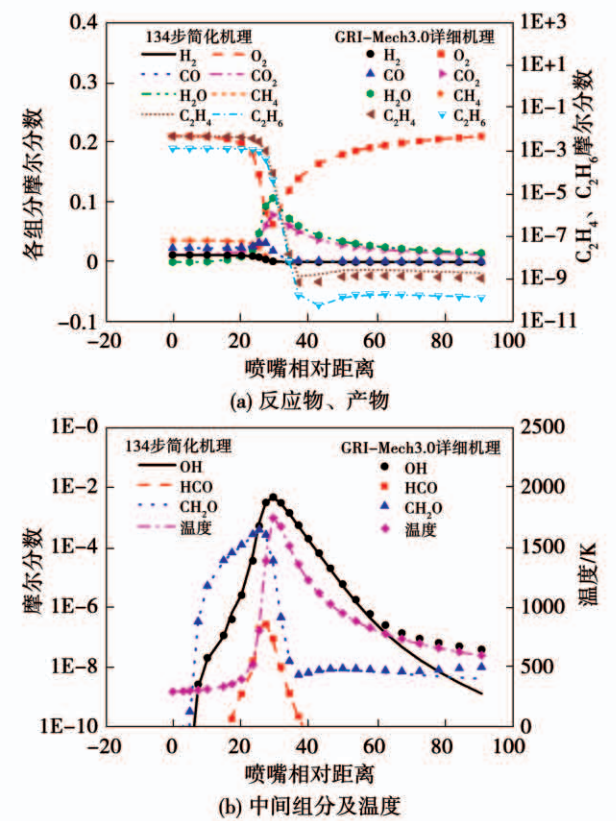


图 10 焦炉煤气射流火焰参数变化

Fig. 10 Variation of jet flame parameters for COG

表 2 给出了采用详细和简化机理时,焦炉煤气射流火焰的数值模拟时长。从中可以看出,在保证计算精度的前提下,简化机理可以节省约 60% 的数值模拟时长。

表 2 数值模拟时间

Tab. 2 Numerical simulation time

耦合机理	时间/h
134 步简化机理	48
GRI-Mech 3.0 详细机理	122

3 结 论

(1) 采用直接关系图法和敏感性分析法,最终

得到了含 25 组分、134 步反应的焦炉煤气简化机理。

(2) 在较宽的参数范围内,简化机理可以准确预测焦炉煤气的点火延迟时间、层流火焰传播速度、火焰温度、组分等,最大误差小于 10%。

(3) 简化机理不仅能够实现焦炉煤气射流火焰的准确数值模拟,还会大幅度减少数值模拟时长,提高数值模拟效率。

参考文献:

[1] LI Z, YI Q, ZHANG Y, et al. Numerical study and design strategy for a low emission coke oven system using oxy-fuel combustion of coke oven gas [J]. Journal of Cleaner Production, 2019, 252:119656.

[2] NIKOLAOU Z M, CHEN J Y, SWAMINATHAN N. A 5-step reduced mechanism for combustion of CO/H₂/H₂O/CH₄/CO₂ mixtures with low hydrogen/methane and high H₂O content[J]. Combustion and Flame, 2013, 160(1):56–75.

[3] SLAVINSKAYA N, BRAUN U M, FRANK P. Reduced reaction mechanisms for methane and syngas combustion in gas turbines [J]. ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2008, 130(2):021504.

[4] 林志勇,周 进,黄玉辉. 基于敏感性分析和准稳态假设简化详细反应机理[J]. 国防科技大学学报, 2007(1):16–20.

LIN Zhi-yong, ZHOU Jin, HUANG Yu-hui. Simplification of detailed reaction mechanism based on the sensitivity analysis and quasi-steady state assumption[J]. Journal of National University of Defense Technology, 2007(1):16–20.

[5] 李 亮,李鹏飞,胡 帆,等. 生物质基合成气燃烧详细机理的评估、简化与验证[J]. 中国电机工程学报, 2020, 40(14):4516–4525, 4731.

LI Liang, LI Peng-fei, HU Fan, et al. Evaluation, reduction and validation of a new reduced mechanism for bio-syngas combustion [J]. Chinese Journal of Electrical Engineering, 2020, 40(14):4516–4525, 4731.

[6] LU T, LAW C K. A directed relation graph method for mechanism reduction[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2005, 30(1):1333–1341.

[7] LU T, LAW C K. Linear time reduction of large kinetic mechanisms with directed relation graph: n-heptane and iso-octane[J]. Combustion and Flame, 2006, 144(1/2):24–36.