

工程热物理

选择性非催化还原化学机制简化与沉降炉内反应流动的数值模拟

李维成, 李振山, 蔡宁生

清华大学热科学与动力工程教育部重点实验室

摘要:

化学反应动力学模型的准确性与计算量的矛盾是限制选择性非催化还原(selective non-catalytic reduction, SNCR)数值模拟的主要因素。通过敏感性分析和引入准稳态假设,对包含60个组分、371个基元反应的SNCR详细机制——?A机制进行简化,得到包含28个组分、97个基元反应的骨架机制及最终的包含12种主要组分、8步总包反应的简化机制模型,减小了化学反应速率的计算量。进一步利用柱塞流反应器(plug flow reactor, PFR)模型计算,验证了反应温度、停留时间以及氨氮摩尔比等因素影响下简化模型的准确性,与常用的SNCR两步总包反应模型相比,有显著的改进。在此基础上,将简化机制的化学反应速率计算程序以用户自定义函数的形式加入Fluent软件,用一维几何模型验证了在商业计算流体力学(computational fluid dynamics, CFD)软件平台上使用简化机制进行SNCR反应流数值模拟的可行性,并进一步对沉降炉SNCR过程进行了CFD模拟,研究了温度、扩散、湍流等因素对SNCR的影响,模拟结果与实验吻合良好。

关键词: 选择性非催化还原 机制简化 准稳态假设 反应流 数值模拟

Mechanism Reduction and Computational Fluid Dynamic Simulation of Selective Non-catalytic Reduction Reacting Flow in Drop Tube Furnace

LI Wei-cheng, LI Zhen-shan, CAI Ning-sheng

Key Laboratory for Thermal Science and Power Engineering of Ministry of Education, Tsinghua University

Abstract:

The trade-off of reliability and computation cost of chemical kinetic models is the major difficulty in selective non-catalytic reduction (SNCR) simulation. Based on ?A mechanism, a detailed mechanism containing 60 species and 371 reactions for SNCR, a skeletal mechanism with 28 species and 97 reactions and further a reduced mechanism model of 12 major species and 8 global steps were established through sensitivity analysis and quasi-steady-state (QSS) assumption, which significantly reduced the computation cost. According to the computations using plug flow reactor model, the reduced mechanism is well consistent with the detailed over a wide range of temperature, residence time, ammonia/NO mole ratio and shows great improvement compared with the two step global kinetic model commonly used. The code of the reduced mechanism was then combined to Fluent, a commercial Computational Fluid Dynamic (CFD) software, by user defined function (UDF) interface to realize the simulation of SNCR reacting flow. A 1D model was first carried out to validate this method, and then the simulation of drop tube furnace was conducted to investigate the effect of temperature, mixing and turbulence. The simulation showed good consistency compared with the experiments.

Keywords: selective non-catalytic reduction(SNCR) mechanism reduction quasi-steady-state (QSS) assumption reacting flow computational fluid dynamic (CFD) simulation

收稿日期 2009-08-30 修回日期 2009-10-30 网络版发布日期 2010-05-20

DOI:

基金项目:

国家863高技术基金项目(2006AA06A304)。

通讯作者: 李维成

作者简介:

作者Email: liweicheng2004@gmail.com

参考文献:

扩展功能

本文信息

- ▶ Supporting info
- ▶ PDF(374KB)
- ▶ [HTML全文]
- ▶ 参考文献[PDF]
- ▶ 参考文献

服务与反馈

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ 引用本文
- ▶ Email Alert
- ▶ 文章反馈
- ▶ 浏览反馈信息

本文关键词相关文章

- ▶ 选择性非催化还原
- ▶ 机制简化
- ▶ 准稳态假设
- ▶ 反应流
- ▶ 数值模拟

本文作者相关文章

- ▶ 李维成
- ▶ 李振山
- ▶ 蔡宁生

PubMed

- ▶ Article by Li,W.C
- ▶ Article by Li,Z.S
- ▶ Article by Sa,N.S

1. 路义萍 李伟力 马贤好 靳慧勇.大型空冷汽轮发电机转子温度场数值模拟[J]. 中国电机工程学报, 2007,27(12): 7-13
2. 王政允 孙保民 郭永红 肖海平 刘欣 白涛.330 MW前墙燃烧煤粉锅炉炉内温度场的数值模拟及优化[J]. 中国电机工程学报, 2009,29(20): 18-24
3. 孙锐 费俊 张勇 梁立刚 吴少华.城市固体垃圾床层内燃烧过程数值模拟[J]. 中国电机工程学报, 2007,27(32): 1-6
4. 吴峰 王秋旺.脉动流条件下带突起内翅片管强化传热数值研究脉动流带突起内翅片管强化传热数值研究[J]. 中国电机工程学报, 2007,27(35): 108-112
5. 蔡杰 徐大勇 吴晖 袁竹林.细长颗粒流化过程取向性的数值模拟研究[J]. 中国电机工程学报, 2007,27(29): 34-39
6. 魏俊梅 林莘.SF6高压断路器压力特性与机械特性耦合数值模拟[J]. 中国电机工程学报, 2007,27(15): 110-116
7. 李少华 袁斌 刘利献 郭婷婷 白珊.多孔横向紊动射流涡量场的数值分析[J]. 中国电机工程学报, 2007,27(23): 100-104
8. 张力 邱赞 唐强 冉景煜.微型预混腔内流体传质影响因素的数值模拟[J]. 中国电机工程学报, 2007,27(11): 78-82
9. 郭婷婷 刘建红 李少华 徐忠.气膜冷却流场的大涡模拟[J]. 中国电机工程学报, 2007,27(11): 83-87
10. 赵伶玲 周强泰.复杂曲面花瓣燃烧器煤粉燃烧数值分析[J]. 中国电机工程学报, 2007,27(5): 39-44
11. 史翊翔 蔡宁生.固体氧化物燃料电池阴极数学模型与性能分析[J]. 中国电机工程学报, 2006,26(4): 82-87
12. 汤光华 徐传龙 孔明 王式民.基于差分吸收光谱法的燃煤锅炉烟气浓度反演算法[J]. 中国电机工程学报, 2007,27(11): 6-10
13. 谢海燕 袁竹林.激冷室内合成气穿越液池过程流动特性与带水问题[J]. 中国电机工程学报, 2007,27(8): 37-41
14. 陈鸿伟 杨官平 杨勇平 王顶辉.基于控制容积面值的对流扩散差分格式[J]. 中国电机工程学报, 2007,27(5): 105-110
15. 方庆艳 周怀春 汪华剑 史铁林.W火焰锅炉结渣特性数值模拟[J]. 中国电机工程学报, 2008,28(23): 1-7