

文章编号:0253-9993(2012)08-1332-05

通风瓦斯蓄热式热氧化过程数值模拟

邓浩鑫^{1,2}, 吕元^{1,2}, 萧琦¹, 肖云汉¹

(1. 中国科学院先进能源动力重点实验室(工程热物理研究所), 北京 100190; 2. 中国科学院研究生院, 北京 100190)

摘要:为模拟通风瓦斯蓄热氧化过程的工作特性,并在此基础上优化关键性参数,建立了包含周期性边界条件和甲烷单步氧化反应机理的单通道均相反应模型,模拟实验室尺度下的以蜂窝蓄热体作为换热介质的蓄热式热氧化过程。用计算流体力学方法计算获得通风瓦斯蓄热式热氧化过程中气体流量、甲烷浓度对装置工作特性的影响。计算结果表明,单侧0.3 m长度的蓄热体,30 s的切换周期,可以满足一定范围内的通风瓦斯氧化需求。模拟给出了稳定和非稳定状态下沿流向的温度分布,可以发现温度分布从启动状态的抛物型温度场,经过上百个切换周期过渡到稳定的梯形温度场,实现自维持运行。

关键词:蓄热式热氧化;通风瓦斯;计算流体力学

中图分类号:TD712.6 **文献标志码:**A

Simulation on regenerative thermal oxidation of ventilation air methane

DENG Hao-xin^{1,2}, LÜ Yuan^{1,2}, XIAO Qi¹, XIAO Yun-han¹

(1. Key Laboratory of Advanced Energy and Power(Institute of Engineering Thermophysics), Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China; 2. Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract: In order to simulate the performance of the thermal oxidation process and optimize the essential parameters, a simplified single channel homogeneous combustion model with periodic boundary conditions and one step methane/air reaction mechanism was proposed for a regenerative thermal oxidizer on laboratory-scale. The basic performance of regenerative thermal oxidation of ventilation air methane were calculated by the computational fluid dynamics(CFD) without a pilot stage. The results show that a ceramic bed of 0.3 m in length at one side is sufficient to operate properly at these conditions. Distributions of temperature on steady and unsteady state condition were respectively simulated by computational fluid dynamics. The initial parabolic temperature distribution gradually evolved into a typical trapezoidal distribution of temperature field after hundreds of switching cycles.

Key words: regenerative thermal oxidation; Ventilation air methane(VAM); computational fluid dynamics

全球范围内煤炭开采每年排放的甲烷量约为300亿 m^3 ,主要通过煤矿通风瓦斯的形式排出^[1]。2008年,中国煤矿涌出瓦斯总量超过200亿 m^3 ,其中70%以上通过煤矿通风瓦斯排出。甲烷具有很强的温室效应,以100 a计,其温室效应相当于 CO_2 的21倍,对臭氧层的破坏能力是 CO_2 的7倍^[2]。因此,有效地处理和利用煤矿通风甲烷,对于温室气体减排和有效利用能源具有重要的意义。目前最有前景的处

理方式是,采用蓄热式热氧化方法实现煤矿通风瓦斯在极低甲烷浓度下(通常甲烷浓度小于1%)自维持氧化处理^[3-5]。

Dobrego^[6-8]和 Gnesdilov^[9-10]等对通风瓦斯的蓄热氧化过程进行了大量的实验和数值模拟研究,并以多孔介质燃烧为基础建立了通风瓦斯的蓄热式氧化过程的数学物理模型。国内的通风瓦斯蓄热氧化研究也已逐步开展,吕元、周娴等^[11-12]设计了处理量为

1 000 m³/h 的煤矿通风瓦斯蓄热式热氧化装置,并研究了甲烷浓度、切换时间、通道流速等参数对装置稳定运行的影响。刘永启等^[13-14]也建立了实验规模的通风瓦斯蓄热式热氧化处理实验装置,并使用多孔介质模型研究了蜂窝结构下的蓄热室内的阻力特性。邓洋波等^[15]按照往复式多孔介质燃烧过程的研究方式,研究了蓄热式热氧化过程的温度分布特性。目前通风瓦斯蓄热氧化过程的研究主要以实验为主,初步的数值模拟工作主要以多孔介质模型为基础,研究对象以一个或者极为有限的几个切换周期的物理模型居多,没有从启动状态经流周期性变换过渡到自维持过程的完整模拟。本文以蓄热换热计算中截面均匀的假设为基础,建立单个流通通道内的通风瓦斯氧化模型,使用 Fluent 软件对通风瓦斯的蓄热式热氧化过程进行数值模拟,研究了从启动状态经周期性切换过渡到拟平衡温度场这一完整过程,同时获得气流速度、甲烷浓度对拟平衡温度场的影响。

1 物理模型

对实验条件下^[12]蓄热体燃烧室内的换热及氧化过程进行数值模拟,煤矿通风瓦斯蓄热氧化装置的结构如图 1 所示。

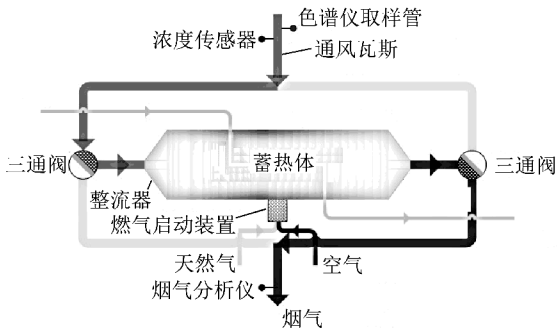


图 1 实验系统示意

Fig. 1 Schematic diagram of the experiment system

在蜂窝蓄热体内,通风瓦斯燃烧是流动、传热及化学反应各种过程相互作用的结果,对全尺度的燃烧过程进行模拟是比较困难的,本文所做的假设如下:

- (1) 通风瓦斯在蜂窝蓄热体截面上各个微型通道内流动、传热以及反应都是均匀的;
- (2) 蜂窝蓄热体的热导率是各向同性的,每个通道都是均一的;
- (3) 忽略温度梯度引起的质量扩散和浓度梯度引起的热扩散;
- (4) 化学反应简化为甲烷和空气的单步反应模型;
- (5) 忽略蜂窝体内微型通道中气流和壁面的辐

射换热。

如图 2 所示,选取长为 700 mm,外截面为 2.5 mm×2.5 mm,流通截面为 2 mm×2 mm,两侧各分布 300 mm 蓄热体,中部留有 100 mm 空腔的计算模型。通道的左右两侧,交替作为低浓度甲烷预混气体的入口和烟气的出口。

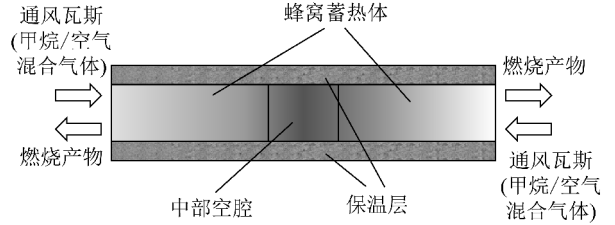


图 2 通风瓦斯蓄热氧化过程简化模型

Fig. 2 Physical model of VAM regenerative oxidation process

2 计算方法

2.1 控制方程

质量守恒方程:

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_g u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

动量守恒方程:

$$\frac{\partial (\rho_g u_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_g u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2)$$

气相能量守恒方程:

$$\frac{\partial (\rho_g E_g)}{\partial t} + \frac{\partial (u_i h_g)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial x_i} - \sum_j h_j J_j + u_i \tau_{ij} \right) + S_h \quad (3)$$

式中, ρ_g 为气体密度; t 为时间; x_i, x_j 为空间坐标; u_i, u_j 为速度矢量; p 为压力; τ_{ij} 为切应力张量; E_g 为气体内能; h_g 为气体的焓值; λ_g 为气体导热率; T_g 为气流温度; h_j 为组分 j 的焓值; J_j 为组分 j 的质量扩散率; S_h 为气相化学反应源项。

固相能量守恒方程:

$$\frac{\partial (\rho_s h_s)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x_i} \right) \quad (4)$$

式中, ρ_s 为蓄热体密度; h_s 为固相的焓值; λ_s 为蓄热体导热系数; T_s 为蓄热体温度。

气体状态方程:

$$p = \rho_g R T_g \quad (5)$$

气相组分守恒方程:

$$\frac{\partial (\rho_g w_j)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_g u_i w_j)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial J_j}{\partial x_i} \right) + R_j \quad (6)$$

式中, R 为理想气体常数; w_j 为组分 j 的质量分数; R_j 为组分 j 化学反应净生成率。

2.2 模型设置及边界条件

甲烷在蜂窝蓄热体中的反应,采用有限速率反应模型。由于并不涉及反应过程中的中间产物以及有关自由基生成的研究,模型使用甲烷氧化的单步总包反应机理,单步反应机理对于反应的热量生成和反应停留时间的计算是基本准确的。边界条件包括周期性切换的入口和出口条件,以及外壁边界条件。将实验中的流量(入口速度)控制,转化为更为合理的压力控制条件,在 Fluent 中使用 UDF 自定义函数设定出入口压力边界条件和甲烷浓度边界条件,实现周期性切换过程的模拟。在本文的模型计算中,使用壁面无散热的假设。

3 模拟结果与分析

3.1 蓄热体中温度分布及甲烷反应特性

图3为甲烷浓度为0.8%,入口流速为2 m/s,切换时间为30 s时的沿流动方向的蓄热体及气流温度分布。横坐标为蓄热式热氧化装置中的轴向位置,左纵坐标为温度值,右纵坐标为氧化反应速率,在图3所示的这个半周期内,模拟的通风瓦斯从左侧入口进入系统,最后从右侧出口排出。经过一个足够长的预热段,在800℃左右,通风瓦斯开始反应,由于此时气流温度仍然低于蓄热体温度,气流通过对流换热从蓄热体吸热。当气流温度等同蓄热体温度时,此时通风瓦斯的氧化反应仍在进行,因此气流温度继续升高。经过气流和蓄热体等温点后,气流温度超过蓄热体温度,并在氧化反应结束时达到温度最高值,然后通过对流换热向蓄热体放热,气流温度降低到中部高温区的蓄热体温度,这个过程在温度场中形成一个局部的温度突跃。气流经过局部的温度突跃区和中部的高温区,在出口端向蓄热体放热,最后以排烟的形式排出。这个过程,形成一个动态的梯形型温度分布;而在实验研究中,由于散热作用的存在,在温度场中部凹陷从而形成M型温度分布^[12,16]。

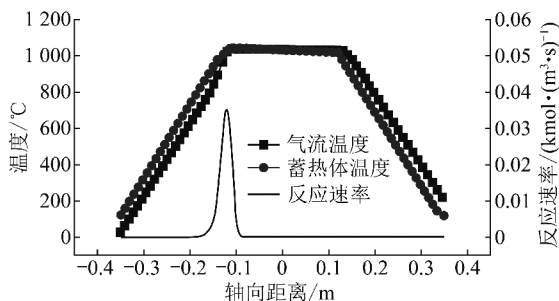


图3 气固温度分布及反应速率

Fig. 3 Temperature and reaction rate of gas and solid phase

3.2 启动温度场和拟平衡温度场

从中部空腔通过燃气启动装置所实现的启动温度场通常近似是抛物型的,在中部空腔中存在局部的间断,但由于空腔距离较短,同时燃气的体积热容远小于蓄热体,空腔的初始温度设定不会影响拟平衡温度场。参照实验的启动温度场^[12]给出几种不同的抛物型启动温度场,并计算几种启动温度场所对应的拟平衡温度场。系统达到拟平衡状态时,气流温度在一个切换周期中变化较大,而蓄热体的体积热容远高于气流,其温度分布在拟平衡状态时是相对固定的,因此选取固相蓄热体的温度分布进行比较分析。图4为3种不同启动温度场所对应的切换周期中同时刻的拟平衡状态温度场,可以看出,几种启动温度场下系统的拟平衡温度场是基本重合的,即系统的拟平衡温度场和启动温度场无关,启动温度场所影响的只是从启动状态到系统准稳态拟平衡的过渡时间。过高的启动温度场一方面对中部蓄热体的耐温特性提出更高的要求,同时也是一种能源的浪费。而过低的启动温度场,则可能导致通风瓦斯未能在系统中完全氧化,当整个切换周期中,排烟带出的热量大于通风瓦斯氧化的产热,蓄热氧化系统将最终熄灭。系统的单侧出口/入口温度由系统内部温度场决定,因此可以用单侧出口/入口温度的波动情况判断系统是否处于拟平衡状态。如图5所示,从启动温度场2经过1 h左右即过渡到拟平衡温度场,这个启动温度场是比较合适的。

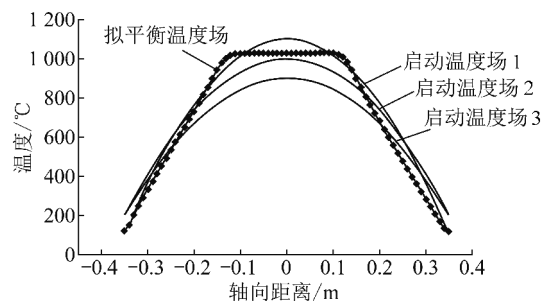


图4 流向启动温度场及其对应的拟平衡温度场

Fig. 4 Quasi-equilibrium temperature profiles of main flow direction at different initial conditions

3.3 流速和甲烷浓度对拟平衡温度场的影响

图6为不同流速下沿流向的蓄热体温度(空腔处为气体温度)分布。从图中可以看出,提高流速会使高温区缩短,这是由于提高流速时,气流和壁面的换热系数并没有同比例的提升,因此通风瓦斯达到点火温度之前在蓄热体中的预热段增长,高温区随之缩短。当流速超过一定的值时,单侧蓄热体不能满足通风瓦斯的预热,高温区逐渐消失,系统整体温度场降

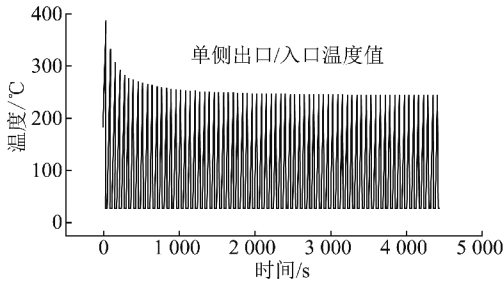


图 5 单侧出口/入口温度变化

Fig. 5 Change of outlet/inlet temperature with time

低导致火焰的吹熄。因此对于结构和运行参数相对固定的通风瓦斯蓄热式热氧化装置而言,其处理能力无法通过单一的提高流速得到提高。

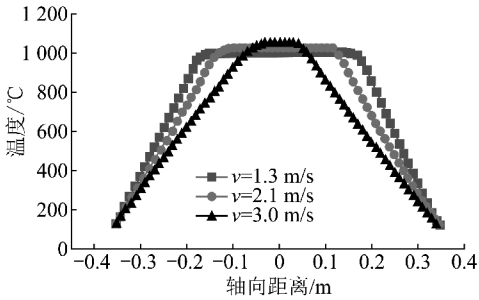


图 6 入口气流速度对拟平衡温度场的影响

Fig. 6 Quasi-equilibrium temperature profiles at different inlet gas velocities

甲烷浓度对温度场的影响如图 7 所示,随着甲烷浓度的降低,梯形温度场的中部高温区逐渐缩短,且高温区的温度值逐步降低。中部高温区的温度值通常近似认为其等于低浓度甲烷的点火温度与其绝热温升的和^[17],因此甲烷浓度降低时高温区的温度值随之降低,高温区温度值的降低会使得低浓度甲烷预热过程所需的长度增加,从而高温区长度也随之缩短。随着甲烷浓度的进一步降低,高温区进一步缩短直至离开蓄热体,在本文建立的物理模型中,数值模拟的结果表明,0.7% 甲烷浓度下,高温区即开始脱离蓄热体,装置的温度场在多个切换周期中逐步降低,最后高温区的温度值无法维持甲烷的氧化,甲烷的燃烧过程趋于熄灭。

高流速和低甲烷浓度对系统的直接影响是中部缓冲高温区的消失,因此维持中部高温区的长度对于维持系统的稳定性是有益的,增大高温区长度的直接方式是增加蓄热体沿流向的长度。表 1 所示的实验研究结果也表明,增加蓄热体的长度能够使得装置的最低自维持浓度降低。由此可见,通风瓦斯蓄热式热氧化过程的数值模拟结果,对参数影响的定性分析和实验的结果是基本相符的。模拟的结果表明单侧 300 mm 长蓄热体时,系统最低自维持浓度为 0.7%

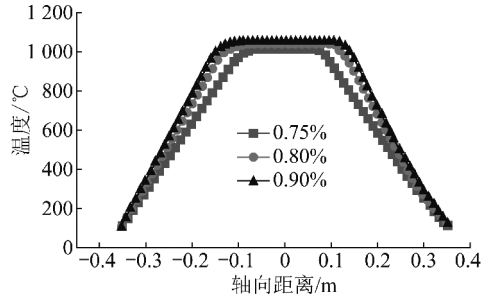


图 7 甲烷浓度对拟平衡温度场的影响

Fig. 7 Quasi-equilibrium temperature profiles at different methane concentrations

表 1 不同蓄热体长度和甲烷浓度下的实验结果

Table 1 Experimental results of different regenerator lengths and methane concentrations

单侧蓄热体长度/mm	甲烷浓度/%	切换时间/s	转化率/%
300	0.90	30	97.5
	0.75	30	不能自维持
500	0.90	30	98.2
	0.75	30	97.9
	0.64	30	不能自维持

左右,而单侧 300 mm 蓄热体的实验研究中装置的最低自维持浓度在 0.75% ~ 0.90%,考虑到实验中散热和测量的因素,可以认为数值模拟的结果和实验结果是基本吻合的。

4 结 论

(1) 拟平衡温度场与启动温度场无关,启动温度场只决定从启动状态到准稳态自维持拟平衡状态的过渡时间。系统的拟平衡温度场,呈梯形分布,并在切换过程中有较小幅度的移动。峰值为 1 000 °C 左右的抛物型启动温度场是节约启动时间和实现氧化系统快速过渡的较优选择。

(2) 对于结构和运行参数固定的蓄热式热氧化系统,存在自维持甲烷浓度下限;浓度下限由蓄热式氧化系统内部蓄热换热的效率决定,可以通过增加蓄热体的长度降低最低自维持甲烷浓度。

(3) 系统同样存在一个处理量的上限,表现在具体的蓄热式热氧化系统中即:入口的气流速度是有上限的。模拟的结果表明,在 30 s 切换周期下,单侧蓄热体长度为 300 m,入口流速小于 3 m/s 时,蓄热式热氧化系统是相对稳定的。

参考文献:

[1] US EPA. Anthropogenic emissions of non CO₂ green-house gases

- 1990—2020[R]. Washington, 2006.
- [2] US EPA. Inventory of US greenhouse gas emissions and sinks 1990—2000[R]. Washington, 2002.
- [3] US EPA. Assessment of the worldwide market potential for oxidizing coal mine ventilation air methane[R]. Washington, 2003.
- [4] US EPA. Technical and economic assessment: mitigation of methane emissions from coal mine ventilation air[R]. Washington, 2000.
- [5] US EPA. Coal mine methane recovery[R]. Washington, 2009.
- [6] Dobrego K V, Gnesdilov N N, Lee S H, et al. Lean combustibility limit of methane in reciprocal flow filtration combustion reactor[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2008, 51: 2190—2198.
- [7] Dobrego K V, Gnesdilov N N, Lee S H, et al. Methane partial oxidation reverse flow reactor scale up and optimization[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2008, 33: 5501—5509.
- [8] Dobrego K V, Gnesdilov N N, Lee S H, et al. Partial oxidation of methane in a reverse flow porous media reactor[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2008, 33: 5535—5544.
- [9] Krzysztof Gosiewski, Anna Pawlaczyk, Krzysztof Warmuzinski, et al. A study on thermal combustion of lean methane-air mixtures; simplified reaction mechanism and kinetic equations[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2009, 154: 9—16.
- [10] Krzysztof Gosiewski, Yurii Sh Matros, Krzysztof Warmuzinski, et al. Homogeneous vs. catalytic combustion of lean methane-air mixtures in reverse-flow reactors[J]. *Chemical Engineering Science*, 2008, 63: 5010—5019.
- [11] 吕元, 姜凡, 肖云汉. 煤矿通风瓦斯甲烷氧化装置实验研究[J]. *煤炭学报*, 2011, 36(6): 973—977.
Lü Yuan, Jiang Fan, Xiao Yunhan. Experimental study of coal mine ventilation air methane[J]. *Journal of China Coal Society*, 2011, 36(6): 973—977.
- [12] 周 娴. 煤矿乏风低浓度甲烷氧化处理实验研究[D]. 北京: 中国科学院工程热物理研究所, 2008.
- Zhou Xian. Experiment study of coal mine ventilation air methane oxidation[D]. Beijing: Institute of Engineering Thermophysics Chinese Academy of Sciences, 2008.
- [13] 郑 斌, 刘永启, 刘瑞祥, 等. 煤矿乏风的蓄热逆流氧化[J]. *煤炭学报*, 2009, 34(11): 1475—1478.
Zheng Bin, Liu Yongqi, Liu Ruixiang, et al. Oxidation of coal mine ventilation air methane in thermal reverse-flow reactor[J]. *Journal of China Coal Society*, 2009, 34(11): 1475—1478.
- [14] 刘永启, 张振兴, 高振强, 等. 乏风瓦斯蓄热氧化床阻力特性的数值模拟[J]. *煤炭学报*, 2010, 35(6): 946—950.
Liu Yongqi, Zhang Zhenxing, Gao Zhenqiang, et al. Numerical simulation on resistance of the regenerative oxidation bed for ventilation air methane[J]. *Journal of China Coal Society*, 2010, 35(6): 946—950.
- [15] 邓洋波, 刘 阳, 解茂昭. 矿井乏风逆流氧化床温度分布和工作特性研究[A]. 2010年中国工程热物理学会年会燃烧学分会论文集[C]. 北京: 中国工程热物理学会, 2010.
Deng Yangbo, Liu Yang, Xie Maozhao. Study on temperature distribution and operation characteristic of VAM oxidation in thermal reverse-flow reactor[A]. *Proceedings of the 2010 Chinese Engineering Thermophysics Society Annual Meeting: Combustion Society [C]*. Beijing: Chinese Engineering Thermophysics Society, 2010.
- [16] 王一坤, 刘银河, 车得福. 通风瓦斯处理系统燃烧特性研究[J]. *工程热物理学报*, 2011, 32(1): 169—172.
Wang Yikun, Liu Yinhe, Che Defu. Study on characteristics of ventilation air methane processing system[J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2011, 32(1): 169—172.
- [17] Kolios G, Frauhammer J, Eigenberger G. Autothermal fixed-bed reactor concepts[J]. *Chemical Engineering Science*, 2000, 55(24): 5945—5967.