烟气 CFD 模拟计算在臭氧烟气脱硝中的应用案例

---济南三康环保科技有限公司　　张国民

摘要：锅炉燃烧生成的烟气成分比较复杂，有 O_2、SO_2、NO_X、H_2O、CO_2、粉尘等，如果将这些物质直接排放到空气中，其中部分物质会对环境产生非常严重的污染损害，目前在烟气排放的时候都要对烟气中的 NO_X 进行处理。因为锅炉的类型较多，燃烧的物质成分复杂，所以对 NO_X 的处理工艺要求也有所不同。臭氧在烟气脱硝中的应用重点是烟气与臭氧的混合反应效率，因为现场的不同，对臭氧与烟气的混合器要求也不同，所以对烟气做 CFD 模拟计算是一种行之有效的手段。

关键词：烟气，脱硝，臭氧，CFD 模拟计算

臭氧在烟气低温脱硝中的应用已经是许多行业可以接受的一种脱硝工艺，但现在出现一种声音对臭氧在脱硝应用中的质疑，这其实是规范的原因。因为锅炉的类型较多，应用的行业不同，锅炉燃烧成分的不同，所以臭氧在烟气脱硝中的应用不能一概而论，特别是臭氧与 NO_X 的摩尔比数值、臭氧与烟气的混合及反应时间等问题。现在个别企业他们没有实质性的技术应用到臭氧在烟气脱硝的工艺，只是生搬硬套，所以最终的结果有差别。下面是一套臭氧在钢铁烧结机烟气脱硝中的应用方案设计，供大家参考。

1、方案设计：

1.1 现场基本参数：

烟气量根据现场测量结果与风机选型对比取得，脱硫塔入口温度 150℃，烟气量 1344000m^3/h，NO_X300mg/Nm^3，$SO_2$600mg/Nm^3，CO5000mg/Nm^3，脱硫塔出口温度 59℃，烟气量 1640000m^3/h。通风机选型参数表中风机入口标态流量 1548000m^3/h。

现场冷却水水质为除盐水，氧气来源为厂区提供纯度 93%以上的氧气，仪表气用压缩空气，电源为厂区提供 380/220V（中性点接地）电压。

1.2 设计性能：

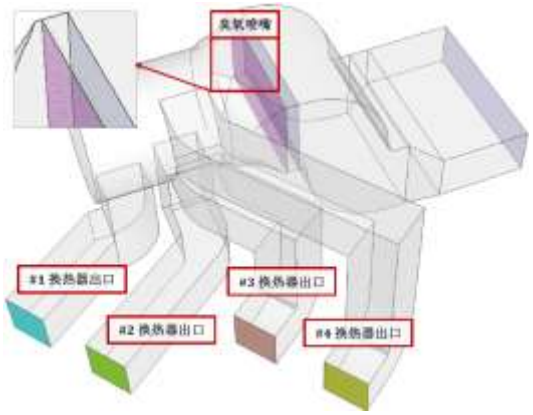
本项目针对烧结机尾部烟气采用臭氧协同脱除工艺，利用厂里现有氧气做为氧气源，经压力、温度检测调节后进入臭氧放电室，在臭氧放电室内的中/高频高压电场内，部分氧气变成臭氧，经流量、压力、温度监测以及气动调节阀后从臭氧发生器出气口提供臭氧。然后在烟道上进行臭氧喷射，将生成的臭氧送至臭氧专用喷射系统中，经过臭氧喷枪喷入烟道中，以保证臭氧与烟气的充分混合反应。反应生成的氧化气份经过现有碱液脱硫塔进行 SO_2 和 NO_X 以及重金属 Hg^{2+} 的协同吸收。最终将 NO_X 排放由 300mg/Nm^3 降低至 150mg/Nm^3 以下满足环保要求。

1.3 臭氧发生器设计：

本项目设计臭氧发生器数量为 9*80kg/h（7 用 2 备）。现场将纯度 93%以上的氧气稳压后送入臭氧发生器放电室中进行 DBD 放电生成浓度较高的臭氧。臭氧发生器采用国际先进的中/高频放电技术，通过调整产品的电源功率调节臭氧产量，满足现场不同工况的臭氧需求。

1.4 烟气 CFD 模拟计算：

本模拟计算对脱硝系统内部烟气流动特性进行 CFD 数值模拟，并重点对臭氧与烟气混合均布情况进行研究。因该项目臭氧投加装置所在直段矩形烟道长度仅 1.0m，空间局促，烟气速度控制断面选为喷嘴上游 0.2m 处截面，臭氧浓度控制断面选为喷嘴下游 0.6m 处截面。



1.4.1 模型假设及简化：

根据该工程的实际运行环境，在满足工程要求条件下，为便于模拟计算，对该净烟道内烟气状况作如下假设和简化：

（1）将烟气视为不可压缩牛顿流体；

（2）模型入口烟道烟气速度分布均匀；

（3）在 CFD 模型中忽略一些对流场影响较小的内部构造（构架，梁等）；

（4）导流板的厚度相对烟道尺寸较小，模拟时假设其厚度为零。

1.4.2 数学模型：

流体运动规律是有物理学的三大守恒定律支配的，即质量守恒定律、动量守恒定律和能量守恒定律。这三大定律对流体运动的数学形式就是流体动力学的基本方程组，这些基本方程组就是流体的控制方程。

本次模拟选用的模型：

（1）基本方程——连续行方程、动量方程及能量方程；

（2）标准的 k- ε 模型——模拟湍流流动。

根据净烟道内烟气流动时湍流的情况，采用标准 k- ε 湍流模型来模拟系统内烟气的湍流运动。在正交直角坐标系下，k- ε 湍流模型基本控制方程可以表示如下：

连续性方程：

$$\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}+\frac{\partial w}{\partial z}=0 \qquad \text{（式 2-1 ）}$$

X 方向的动量方程：

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho uu)+\frac{\partial}{\partial y}(\rho uv)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho uw)=$$

$$-\frac{\partial p}{\partial x}+2\frac{\partial}{\partial x}(\mu_t\frac{\partial u}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial y}[\mu_t(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x})]+\frac{\partial}{\partial z}[\mu_t(\frac{\partial u}{\partial z}+\frac{\partial w}{\partial x})]+\rho gx \qquad \text{（式 2-2 ）}$$

式中：

μ_t —湍流粘性系数$\mu_t = c_\mu\rho\frac{k2}{\varepsilon}$

P —流体压力；

ρ —气体密度。

Y 方向的动量方程：

$$\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}(\rho uv)+\ \frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}(\rho vv)+\ \frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}(\rho vw)=$$

$$-\frac{\partial \mathrm{p}}{\partial \mathrm{y}}+2\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}(\mu_t\frac{\partial \mathrm{v}}{\partial \mathrm{y}})+\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}[\mu_t(\frac{\partial \mathrm{u}}{\partial \mathrm{y}}+\frac{\partial \mathrm{v}}{\partial \mathrm{x}})]+\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}[\mu_t(\frac{\partial \mathrm{w}}{\partial \mathrm{y}}+\frac{\partial \mathrm{v}}{\partial \mathrm{z}})]+\rho gy \qquad \text{（式 2-3 ）}$$

Z 方向的动量方程：

$$\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}(\rho uw)+\ \frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}(\rho vw)+\ \frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}(\rho ww)=$$

$$-\frac{\partial \mathrm{p}}{\partial \mathrm{z}}+2\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}(\mu_t\frac{\partial \mathrm{w}}{\partial \mathrm{z}})+\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}[\mu_t(\frac{\partial \mathrm{u}}{\partial \mathrm{z}}+\frac{\partial \mathrm{w}}{\partial \mathrm{x}})]+\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}[\mu_t(\frac{\partial \mathrm{v}}{\partial \mathrm{z}}+\frac{\partial \mathrm{w}}{\partial \mathrm{y}})]+\rho gz \qquad \text{（式 2-4 ）}$$

k 方程：

$$\rho(u\frac{\partial \mathrm{k}}{\partial \mathrm{x}}+v\frac{\partial \mathrm{k}}{\partial \mathrm{y}}+w\frac{\partial \mathrm{k}}{\partial \mathrm{z}})=\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}(\Gamma_k\frac{\partial \mathrm{k}}{\partial \mathrm{x}})+\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}(\Gamma_k\frac{\partial \mathrm{k}}{\partial \mathrm{y}})+\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}(\Gamma_k\frac{\partial \mathrm{k}}{\partial \mathrm{z}})+G_k-\rho\varepsilon \qquad \text{（式 2-5 ）}$$

式中：

G_k —湍流产生项，

$$G_k=\mu_e\{2[(\frac{\partial \mathrm{u}}{\partial \mathrm{x}})^2+(\frac{\partial \mathrm{v}}{\partial \mathrm{y}})^2+(\frac{\partial \mathrm{w}}{\partial \mathrm{z}})^2]+(\frac{\partial \mathrm{u}}{\partial \mathrm{y}}+\frac{\partial \mathrm{v}}{\partial \mathrm{x}})^2+(\frac{\partial \mathrm{w}}{\partial \mathrm{x}}+\frac{\partial \mathrm{u}}{\partial \mathrm{z}})^2+(\frac{\partial \mathrm{v}}{\partial \mathrm{z}}+\frac{\partial \mathrm{w}}{\partial \mathrm{y}})^2\}$$

ε 方程：

$$\rho(u\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathrm{x}}+v\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathrm{y}}+w\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathrm{z}})=\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}(\Gamma_k\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathrm{x}})+\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}(\Gamma_k\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathrm{y}})+\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}(\Gamma_k\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathrm{z}})+c_1G_k\frac{\varepsilon}{\mathrm{k}}-\rho c_2\frac{\varepsilon 2}{\mathrm{k}} \qquad \text{（式 2-6 ）}$$

以上微分方程，可以写成以下的通用形式：

$$\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}(\rho u\emptyset)+\ \frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}(\rho v\emptyset)+\ \frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}(\rho w\emptyset)=\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}(\Gamma_\emptyset\frac{\partial \phi}{\partial \mathrm{x}})+\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}(\Gamma_\phi\frac{\partial \phi}{\partial \mathrm{y}})+\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}(\Gamma_\phi\frac{\partial \phi}{\partial \mathrm{z}})+S_\phi \qquad \text{（式 2-7 ）}$$

式中：

$\emptyset$ —因变量；

$\Gamma_\emptyset$ —扩散系数；

S_ϕ ——源项。

式 2-1 至式 2-6 可以表示成统一的输运方程形式：

$$div(\rho\vec{V}\phi)=div(\Gamma_\phi grad_\phi)+S_\phi \qquad \text{（式 2-8 ）}$$

式中各项从左至右依次为对流项、扩散项和源项。

1.4.3 网格划分及边界条件：

网格是 CFD 模型的几何表达形式，也是模拟和分析的载体。网格质量对 CFD 计算精度和计算效率有重要的影响。对于复杂的 CFD 问题，网格生成极为耗时，且极易出错，生成网格所需的时间常常大于 CFD 计算的时间。无论对于结构化还是非结构化网格都是按以下过程生成网格：

（1）建立几何模型，在此过程中根据计算需要对几何模型进行适当的简化；

（2）划分网格，在所生成的几何模型上应用特定的网格类型、网格单元和网格密度对面或体进行划分；

（3）指定边界区域，为模型的每个区域指定名称和类型，为后续给定模型的物理属

性、边界条件和初始条件做好准备。

本研究采用四面体和六面体网格对三维模型进行分区域网格划分。与模型外形尺寸相比，因气流均布板开孔、臭氧射流喷嘴尺寸相对较小，为了精确考察烟气流场情况，将气流均布板和臭氧投加段区域的网格进行了加密，经网格无关性检验，确定模型网格计算单元总数量约 613 万(Measured maximum value 0.96),通过了网格检验(mesh check)，模型网格划分参见图 1-1 所示。

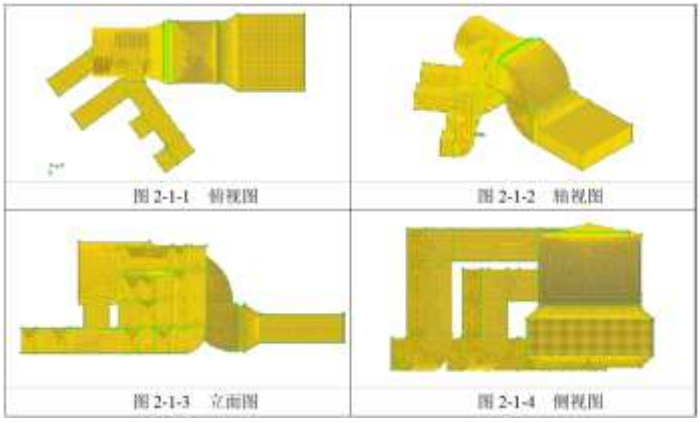


图 1-1　脱硝系统三维模型网格示意图

烟气入口边界条件为速度入口，出口边界条件为压力出口，出口压力取 1 个标准大气压。计算过程中，为防止壁面非线性发散，采用低松弛迭代的变松弛系数法，模型壁面采用标准壁面函数，具体参数设置见表 1-1

表 1-1　模拟参数表

序号	项目	值
1	模型选择	
	粘性模型	Standard k-ε
	组分模型	Species Transport
	能量方程	Energy Equation
2	边界条件	
	入口边界	Velocity-inlet
	出口边界	Pressure-outlet
	壁面	Standard Wall Functions
3	烟气参数	
	烟气总量（4 个换热器）	1,300,000 Nm^3/h
	烟气温度	100～150℃，取 130℃
	O_3浓度	148 mg/L
	O_3流量	2880 Nm^3/h
	O_3温度	常温，取 20℃
	O_3压力	0.098 MPa
	NO_X浓度	300 mg/Nm^3

1.4.4 模拟结果：

（1）无导流装置方案数值模拟计算结果分析

在无导流装置方案（BMCR 工况）下，即换热器出口汇集烟道方圆节未加装气流均布板的情形时，臭氧喷嘴上游 0.2m 处截面速度分布标准偏差为 5.08 m/s，平均速度为 11.24 m/s，偏差系数为 45.2%，参见图 1-2 所示。

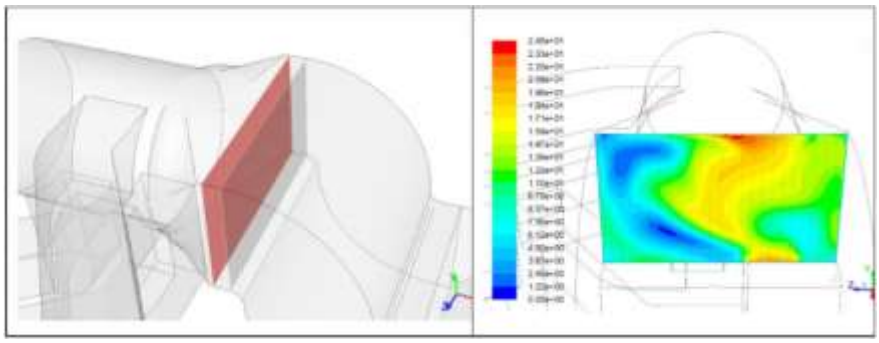


图 1-2　无导流装置臭氧喷嘴上游 0.2m 截面速度 CFD 云图（m/s）

在无导流装置方案（BMCR 工况）下，臭氧喷嘴下游 0.6m 处截面 O_3浓度分布标准偏差为 5.35×10^{-5}kmol/m^3，平均浓度为 6.28×10^{-5}kmol/m^3，偏差系数为 85.2%，臭氧浓度分布严重不均匀，对 NOx 脱除不利，臭氧浓度分布云图参见图 1-3 所示。

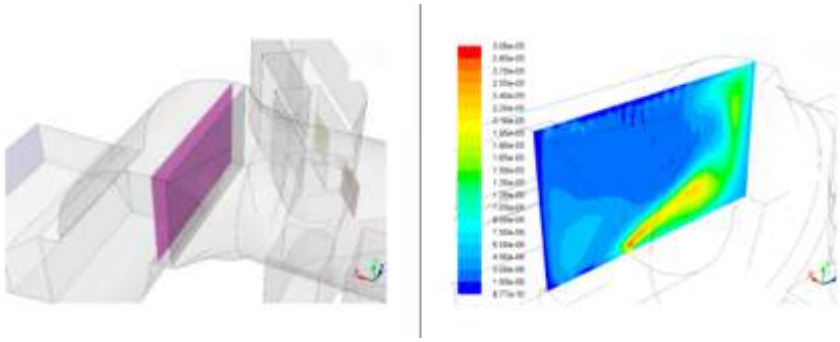


图 1-3　无导流装置臭氧喷嘴上游 0.2m 截面 O_3浓度 CFD 云图（m/s）

在无导流装置方案（BMCR 工况）下，烟道内部烟气运动轨迹图参见图 1-4、图 1-5 所示。俯视图中，来自四个换热器出口的烟气在圆形烟道汇集以后，受接口位置及空间相互影响，烟气明显偏向于烟道外侧（图 1-4 下部区域），而在方圆节及其下游段内侧（图 1-4 上部区域）形成较大涡流；侧视图中，烟气大部分集中于烟道顶部（图 1-5 上部区域）。烟气的局部集中及涡流区的存在，不利于臭氧与原烟气的充分混合，进而影响脱硝效率。

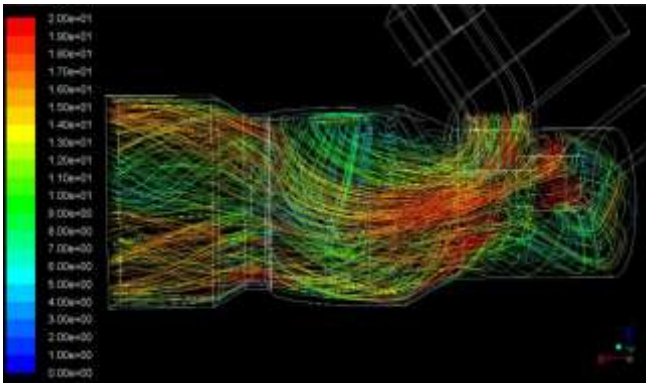


图 1-4　无导流装置烟道内部烟气运动轨迹图-俯视图(m/s)

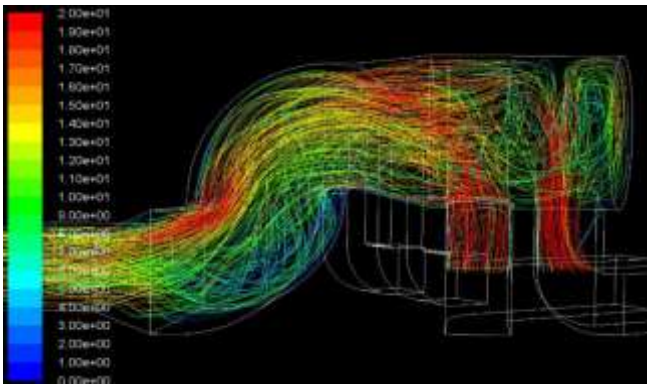


图 1-5　无导流装置烟道内部烟气运动轨迹图-侧视图(m/s)

（2）有导流装置方案数值模拟计算结果分析

基于 CFD 数值模拟，经反复论证比对不同方案，确定“气流均布板+整流格栅”的导流装置布置方案为本报告最终方案，在臭氧布气管中心线上游 1200mm 处（方圆节内）设置气流均布板，其背风面设置整流格栅兼具加强支撑作用，参见图 1-6 所示。

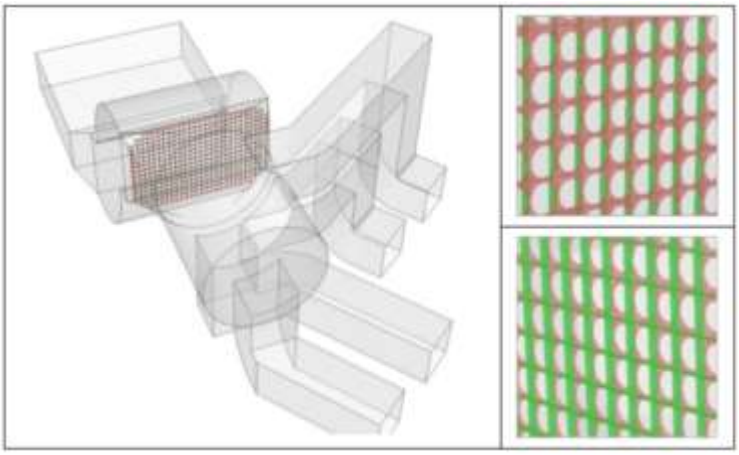


图 1-6　流装置烟道布置示意图

经 CFD 优化模拟计算（BMCR 工况），加装气流均布板及整流格栅后，臭氧喷嘴上游 0.2m 处截面速度分布标准偏差为 2.61m/s，平均速度为 9.99m/s，偏差系数为 26.1%，相较优化前的 45.2%降低了 19 个百分点，效果提升 43%，速度云图参见图 1-7 所示。

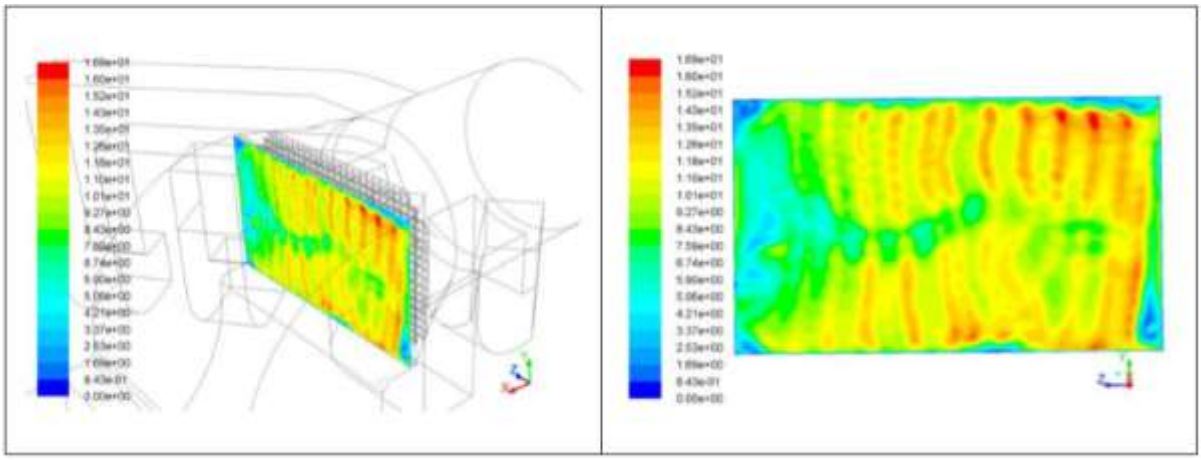


图 1-7　有导流装置臭氧喷嘴上游 0.2m 截面速度 CFD 云图(m/s)

经 CFD 优化模拟计算（BMCR 工况），加装气流均布板及整流格栅后，臭氧喷嘴下游

0.6m 处截面 O_3 浓度分布标准偏差为 1.59×10^{-5}kmol/m^3，平均浓度 4.10×10^{-5}kmol/m^3，偏差系数为 38.8%，相较优化前的 85.2%降低了 46 个百分点，效果提升 54%，浓度云图参见图 1-8 所示。

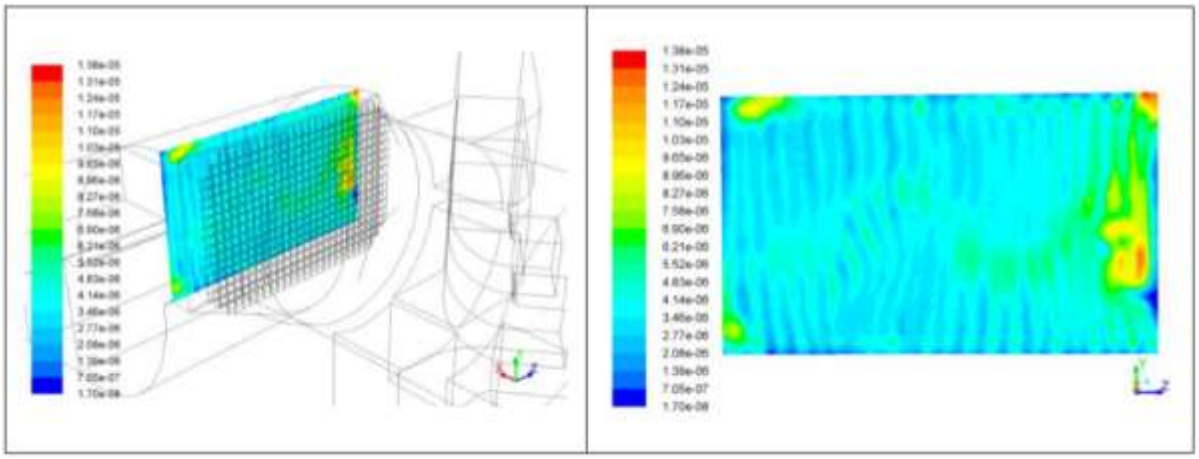


图 1-8　有导流装置臭氧喷嘴下游 0.6m 截面 O^3 浓度 CFD 云图(kmol/m^3)

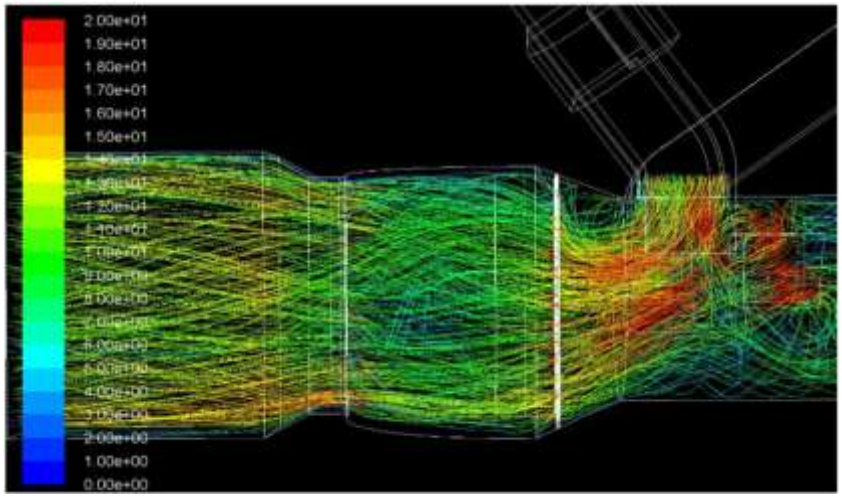


图 1-9　有导流装置烟道内部烟气运动轨迹图-俯视图(m/s)

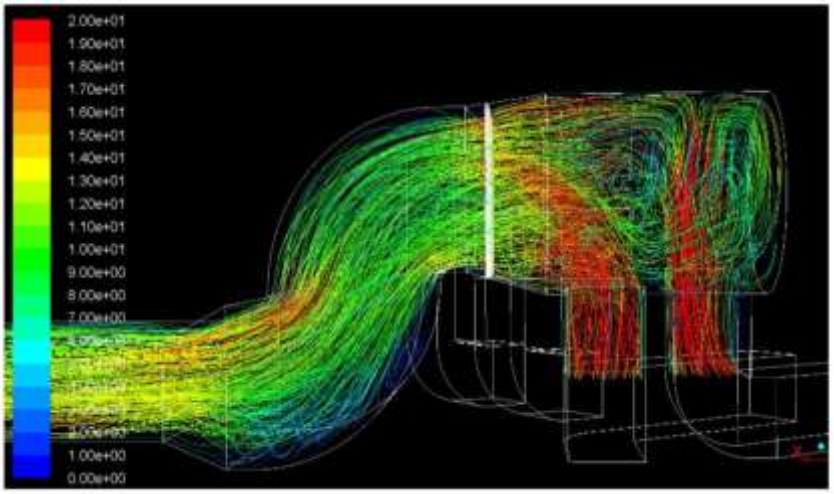


图 1-10　有导流装置烟道内部烟气运动轨迹图-侧视图(m/s)

2、实际应用

根据烟气 CFD 模拟计算，现场在烟道臭氧布气管中心线上游 1200mm 处设置“气流均布板+整流格栅”的导流装置。







日期	投入臭氧量 kg/h	臭氧浓度 mg/l	入口 NO_X 浓度 mg/Nm^3	出口 NO_X 浓度 mg/Nm^3	NO_X 下降值
设计值	560	148	300	150	150
2018.04.10	115	146.1	262.5	230.3	32.2
2018.04.11	225	146.8	281.9	218.9	63.0
2018.04.13	330	146.1	202.3	106.6	95.7
2018.04.16	410	146.3	279.3	156.3	123.0
2018.04.18	520	146.2	280.7	119.5	161.2

3、结论：

烟气 CFD 模拟计算正确有效，臭氧低温脱硝效果完全达到最初的设计值。