

文章编号: 1000-8055(2008)08-1359-05

小型化催化重整煤油燃气发生器的数值模拟

侯凌云, 卢小丰

(清华大学 航天航空学院, 北京 100084)

摘 要: 催化重整燃气发生器是在线产生氢气的有效途径, 有助于碳氢燃料超燃冲压发动机的着火和燃烧. 通过对新设计的小型化燃气发生器乳化煤油的燃烧及催化重整进行数值模拟, 在计算结果和试验数据吻合基础上, 分析了出口燃气的总体状态和影响催化重整各参数的变化规律, 确定了研究涉及到的参数范围内的最佳工况点, 并揭示了内部的燃烧状态和一些难测量成分含量变化趋势, 从而进一步指导设计和试验.

关 键 词: 催化重整; 燃气发生器; 数值模拟; 超燃冲压发动机

中图分类号: V235.14

文献标识码: A

Numerical simulation of flaming gas generator with catalytic reforming process

HOU Lingyun, LU Xiaofeng

(School of Aerospace, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Catalytic reforming gas generator is the effective method of producing on-line hydrogen, which is good for the ignition and combustion of hydrocarbon fuel in the scramjet. The combustion and catalytic reforming process were simulated numerically in the new designed gas generator. Based on the agreement between simulated results and experimental data, the parameter variation laws affecting the content of exit gas were concluded. The optimal parameters, the internal combustion characteristic and the content of difficult measured components were obtained. They are a supplement of the experimental results and provide the theory foundation for the design.

Key words: catalytic reforming; gas generator; numerical simulation; scramjet

催化重整制氢和氨合成气广泛应用在化工领域, 近年来在能源领域也有着广阔应用前景, 如甲醇的水蒸气重整^[1]、内燃机镍基催化燃烧等^[2]. 由于氢气具有热值高、火焰传播速度快、点火能低、扩散系数大等优异性能, 是理想的超燃冲压发动机燃料. 国内外有研究者指出, 在发动机中加入少量氢(0.5%~2.0%), 能明显地改善燃烧过程, 提高效率^[3]. 发动机中的氢气来源有两类, 一类是直接携带氢, 一类是间接制氢. 前者对于小型飞行器来说是不实用的, 因此采用重整燃烧器出口产生

的氢气与燃料混合燃烧时解决碳氢燃料超燃冲压发动机点火延迟时间长、火焰不稳定、易吹熄的有力途径. 在碳氢燃料超燃冲压发动机催化重整燃烧方面, 俄罗斯^[4]、清华大学^[5]进行了一系列的原理设计和基础性实验, 但数值模拟方面尚少有文献提及.

由于测量手段的有限, 不能了解整个燃气发生器的内部燃烧状态以及一些难以测量的气体含量变化, 但数值模拟方法却能在这些方面对试验状态进行模拟, 因此常用来分析试验结果以及预

测变化趋势. 催化重整燃气发生器内的反应不仅包含了煤油与空气的燃烧过程, 还有碳氢化合物与水蒸汽的催化重整过程, 因此其内部反应状态更加复杂. 通过数值模拟能够了解内部的燃烧状态和分析一些难测量成分含量变化趋势, 可作为试验结果的补充和指导.

1 物理和数学模型

1.1 物理模型

实际的燃气发生器为三维结构, 其在圆周方向可认为基本对称, 为简化处理, 采用二维轴对称模型进行计算; 另外试验中发生器内的燃烧状态会随时间而发生变化, 但在采集出口燃气时, 必须保持稳定状态, 因此设计模拟状态为稳定燃烧. 图 1 是高压燃气发生器的二维轴对称结构计算域示意图. 空气从前部旋流进入炉膛, 形成回流区, 燃料为掺水 10% 的乳化煤油, 分为一次油和二次油, 以射流的形式喷入炉膛, 一次油在旋流空气的中心以雾化角为 60° 的方向喷入与空气混合燃烧, 二次油喷射位置在燃烧段约 $2/3$ 处, 经过雾化喷入燃烧段后, 蒸发成气态, 作为催化重整反应物. 在催化段内表面进行催化重整反应, 生成的可燃气成分在收缩段加速喷出, 以供给超燃冲压发动机.

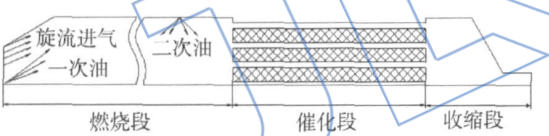


图 1 燃气发生器的计算域示意图

Fig. 1 Computational domain of gas generator

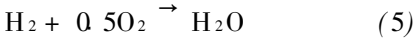
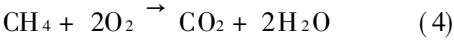
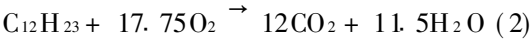
1.2 数学方程和模型

湍流流动的二维轴对称时均控制方程如下:

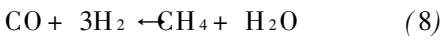
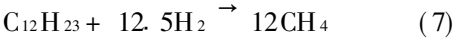
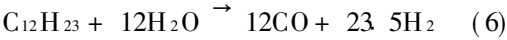
$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + S_\phi + S_{p\phi} \quad (1)$$

其中 ϕ 是通用因变量, 分别代表 $1, u, v, w, k, \varepsilon, h, Y_i, \Gamma_\phi$ 是输运系数, S_ϕ 是气相本身的源项, $S_{p\phi}$ 是颗粒相产生的源项. 采用标准的 $k-\varepsilon$ 模型来描述气相湍流流动; 使用颗粒轨道模型来描述液体射流; 使用四通量模型来模拟燃烧室内的辐射传热; 使用单颗粒蒸发模型来描述煤油和水蒸发过程; 使用 EBU-Arrhenius 模型来描述蒸发产生的煤油蒸汽和重整反应产物的湍流燃烧; 使用壁面反应模型来描述碳氢燃料和水蒸汽的催化重整反

应. 其燃烧主要包括以下化学反应:



煤油与水蒸汽的催化重整反应包括以下反应过程^[6]:



在上述反应中, 反应式 (6) 和式 (7) 被认为是不可逆的, 反应式 (8) 则为可逆的, 以上反应速率分别为

$$\dot{\omega}_{1,c} = \frac{K_1 p_F p_W}{(A + nK_3 + p_F)(p_H + K_W p_W)} \quad (9)$$

$$\dot{\omega}_{2,c} = \frac{K_2 p_F p_H}{A + nK_3 + p_F} \quad (10)$$

$$\dot{\omega}_{3,c} = \frac{K_M p_{CO} p_H^2 A (1 - \beta)}{(A + nK_3 + p_F)(p_H + K_W p_W)} \quad (11)$$

其中 $A = p_H + \frac{K_1}{K_2} \cdot \frac{p_W}{p_H + K_W p_W}$, $\beta = \frac{p_{CH_4} p_W}{p_{CO} p_H^3 K_M}$, p_F, p_H, p_W, p_{CO} 和 p_{CH_4} 分别代表煤油、氢、水、一氧化碳和甲烷的分压. K_1, K_2, K_3, K_M, K_W 分别是各反应温度的函数.

当在壁面发生催化反应时, 组分和能量方程的边界条件如下:

$$\left. \rho_m \frac{\partial Y_m}{\partial n} \right|_w = W_m \sum_r (b_{mr} - a_{mr}) \dot{\omega}_{r,c} \quad (12)$$

$$\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_w = \sum_r Q_r \dot{\omega}_{r,c} \quad (13)$$

其中下标 m 表示第 m 组分, r 是第 r 个反应, s 表示壁面, $\dot{\omega}_{r,c}$ 是壁面催化反应速率.

2 试验结果与分析

在试验中, 外部可控制的参数只有空气量以及一次油和二次油量, 通过调节这些参数, 就可以获得不同压力, 不同温度的出口燃气, 因此模拟计算也主要按照油量和空气量的不同分别进行了模拟, 首先对计算结果和试验结果进行比较, 再对典型工况下的内部燃烧状态, 以及难测量的气体含量变化进行分析, 计算不同工况的出口热值, 为联合试验提供参数依据.

2.1 内部流动和燃气成分分析

图 2 为油流量 30 g/s, 空气流量 70 g/s 时的流函数分布图. 其一次油为 5 g/s, 二次油为 25 g/s, 由于进口为强旋流进气, 与离心喷嘴喷雾

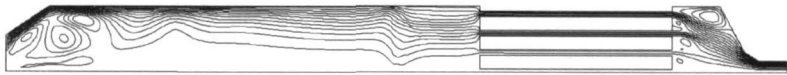


图 2 流函数分布

Fig. 2 Profile of stream function

掺混, 在前端形成较短回流区, 空气量和油量的增大使前端旋流紊流加强, 这也正是火焰能够稳定在前部燃烧的原因. 图 3 为油流量 30 g/s, 空气流量 70 g/s 时的氢气摩尔浓度分布图, 从图可看出, 氢气由催化段壁面反应产生的, 基本分布在催化段后端, 氢气的平均浓度在 5%~7% 之间.

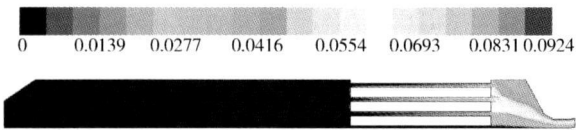


图 3 氢气摩尔浓度分布

Fig. 3 Profile of hydrogen mole fraction

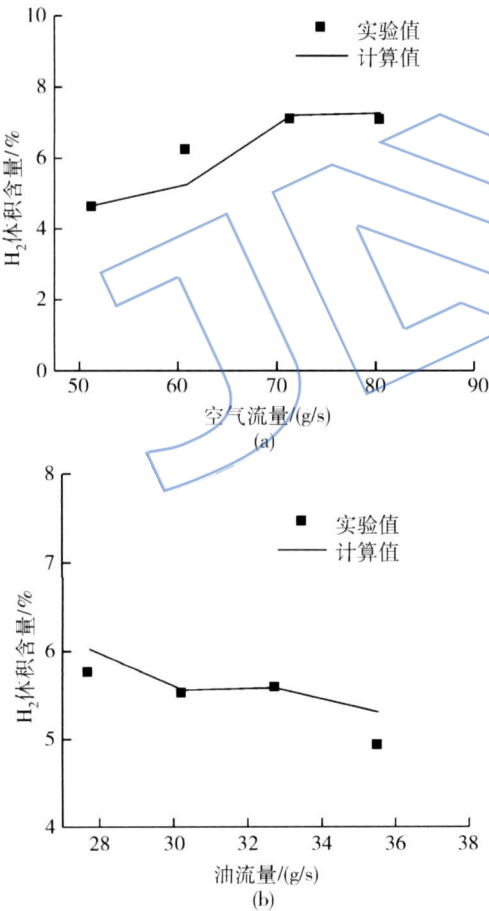


图 4 出口燃气中氢气含量与空气量和油量的关系

Fig. 4 Relation of hydrogen content

图 4 是出口燃气中氢气含量与空气量和油量关系的计算值与试验值^[7]对比, 计算与试验值吻

合较好. 图 4(a) 是在相同油量(即总油量 30 g/s)时, 氢气含量随空气量变化关系, 出口燃气中氢气含量随空气量的增加略有升高, 这是由于空气量增加, 催化体的温度也会升高, 促进重整反应, 氢气含量相应会增加; 图 4(b) 是在相同空气量 66 g/s 时, 氢气含量随空气量变化关系, 氢气含量随油量增加略有降低, 因油量的增加造成催化体温度的下降.

表 1 是在油量为 30 g/s, 空气流量为 70 g/s 时的典型工况下, 出口各燃气成分含量实验与计算结果对比, 由于实验结果都是除湿后的测量结果, 所以表格列出了除湿前和除湿后的计算结果, 本文由于没有考虑煤油分解的模型, 所以计算结果中缺少乙烯的含量. 计算与实验结果基本接近. H₂ 的生成和消耗主要受到反应式(6) 和式(5) 控制, 在高温缺氧催化剂表面处能存在较多含量的氢气, 计算中与氧气混合更为均匀, 因此氢消耗较快, 其含量略低, 在催化重整反应模型中, CH₄ 与水蒸汽能被迅速催化转为 H₂ 和 CO, 但在实验中由于接触面积和反应时间的限制, CH₄ 很难完全被催化生成 H₂ 和 CO, 所以计算中的 CH₄ 含量略为偏低. 而 CO 和 CO₂ 的含量与燃烧状况有关, 在燃烧反应中, 根据 CO 的燃烧模型, 设有 CO₂= CO+ 0.5O₂ 的平衡反应, 同时 CO 也是催化重整反应的产物之一.

表 2 是不同燃料在相同进口热值和相同余气系数情况下, 对比甲烷、煤油、乳化煤油经燃气发生器燃烧反应后出口燃气的总燃烧热值的数值计算结果, 可以看出, 出口平均温度甲烷比煤油高, 煤油比乳化油高, 无催化比有催化高, 但出口燃气燃烧热值情况却相反, 有催化的乳化油出口燃气燃烧热值比纯煤油的高 2.9%, 比无催化乳化油的高 3.2%, 比甲烷高 10.8%. 因此从出口气体的燃烧热值角度来说, 有催化的乳化煤油出口可燃燃气效果最好.

2.2 头部余气系数影响分析

燃料(乳化煤油)是分一次油和二次油进入燃烧室的, 头部余气系数就是一次油与空气的余气系数. 一般说来, 余气系数接近 1 或稍大, 燃烧状

表 1 典型工况出口燃气含量计算与试验结果^[7]对比

Table 1 Comparison between simulated and experimental outlet gas content the under the classical condition

	H ₂	CH ₄	C ₂ H ₄	CO	CO ₂	C ₁₂ H ₂₃	H ₂ O	N ₂
试验结果/%	7.07	1.13	5.77	4.88	8.96			
计算结果/%	6.11	0.28		5.13	6.74	4.24	13.31	61.2
除湿前结果/%	7.21	0.33		6.05	7.95			

表 2 不同燃料相同进口热值和余气系数条件下比较出口总热值

Table 2 Total heat value of different fuel under the same inlet heat value and air excess coefficient

	燃料量/(g/s)	进口燃料热值/10 ⁶ J/s	空气量/(g/s)	出口温度/K	出口燃气燃烧热值/10 ⁵ (J/s)
纯煤油	27	1.24	70	1 114.9	10.71
乳化油(有催化)	30	1.24	70	1 062.2	11.02
乳化油(无催化)	30	1.24	70	1 106.2	10.68
甲烷	26.1	1.24	76.5	1 146.3	9.82

况会更好,但由于燃气发生器需要制造可燃气体,当氧气有剩余会降低可燃气体含量,因此头部余气系数过小,则燃烧状态不好,影响催化体温度,但如果过大则氧气过量,影响催化重整反应的产物,所以头部余气系数的好坏也关系到整个燃气发生器的产气效果.

图 5 是在同油量、同空气量时,不同头部余气系数时的氧气摩尔浓度分布图,可以明显对比看出:当头部余气接近 1,氧气剩余含量到达催化段,而当头部余气系数在 0.5 附近,氧气含量在燃烧段 2/3 处消耗完.

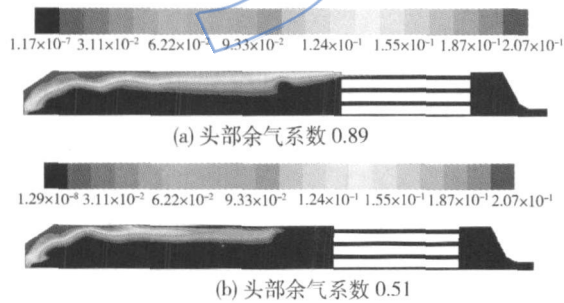


图 5 同油量、同空气量,不同头部余气系数时的氧气摩尔浓度分布

Fig.5 Profile of oxygen mole fraction under the different upstream air excess coefficient

图 6 是空气量和总油量都相同,但一次油和二次油配给不同(即头部余气系数不同)时的氢气含量和出口燃气温度变化趋势图,氢气含量计算值与试验值吻合较好,但出口燃气计算值高于试

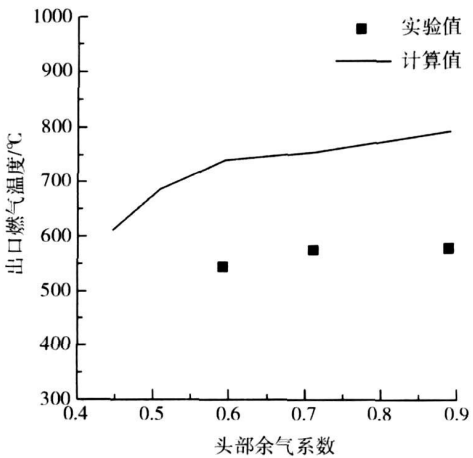
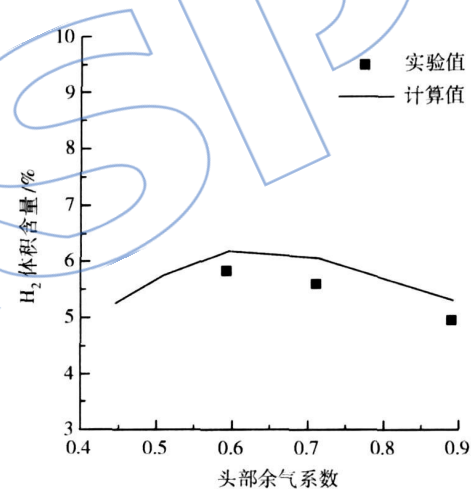


图 6 头部余气系数与氢气含量、出口燃气温度的关系

Fig.6 Variance of upstream air excess coefficient vs. hydrogen content and outlet gas temperature

验值,这是由于燃烧反应仅考虑了完全反应,未考虑裂解等吸热反应.从计算数据变化趋势可看出,出口燃气温度基本随头部系数的增加而升高,但氢气含量的变化趋势为先升高,后又降低.分析原因,当头部余气系数增大时,前端的燃烧效果越好,出口燃气温度越高,同时催化体的温度也越高,促进了催化重整反应,所以氢气含量会升高,当头部余气系数越接近 1,虽然催化体温度和燃气温度都还继续升高,但由于此时氧气在前段难以完全耗尽,反而会降低出口燃气中的氢气含量.可见头部余气系数也是一个影响出口燃气参数比较关键的因素,在综合考虑出口燃气的氢气含量和温度时,须找一个最佳头部余气系数,满足出口燃气中的氢气含量较高而温度也不太低.因此在空气量和总油量固定的情况下,为获得更好的出口燃气,头部余气系数最好控制在 0.6~ 0.7 之间.

3 总 结

对于燃气发生器乳化煤油的燃烧和催化重整过程,在数值计算结果与试验值吻合基础上,得到如下基本规律:

- 1) 通过对流函数图和温度分布图的分析,说明旋流进气能够在头部形成稳定回流区,保证了燃料在前部稳定燃烧,从而为燃烧器的旋流设计奠定了理论基础.
- 2) 空气流量是决定燃烧器燃烧状态和出口状态的关键因素,因此选择空气流量,既关系到燃烧室内压力,也关系到出口温度和气体成分含量;油量增加会出口燃气含量略微下降;头部余气系数同样会影响出口燃气的状况,通过计算发现,在不改变空气量和总油量的情况下,头部余气系数在 0.6~ 0.7 时,能产生较高质量的出口燃气.
- 3) 对比纯煤油、乳化煤油以及甲烷不同燃料,有催化的乳化煤油在燃气发生器中所产生的

可燃燃气出口热值最高.

参考文献:

[1] 吴倩,王弘弼,朱炳辰,等. 甲醇催化重整制氢的宏观反应动力学[J]. 石油化工, 2003, 32(6): 483-486.
WU Qian, WANG Hongshi, ZHU Bingchen, et al. Study on the global reaction kinetics of hydrogen production by methanol steam reforming[J]. Petrochemical Technology, 2003, 32(6): 483-486. (in Chinese)

[2] 宋文生,李磊,王宇新. 燃料电池汽车氢源[J]. 汽车工程, 2003, 25(4): 15-17.
SONG Wensheng, LI Lei, WANG Yuxin. Hydrogen source of fuel cell vehicles[J]. Automotive Engineering, 2003, 25(4): 15-17. (in Chinese)

[3] 崔可润,高孝洪,乌克兰尼古拉耶夫造船学院. 柴油机加氢降低燃油消耗的研究[J]. 武汉水运工程学院学报, 1992, 16(3): 253-258.
CUI Kerun, GAO Xiaohong, ТИМОШЕВСКИЙ БГ, Сирота АА, Беляков СЮ. Research on reducing fuel consumption by adding hydrogen into diesel engines[J]. Journal of Wuhan University of Technology, 1992, 16(3): 253-258. (in Chinese)

[4] Kuranov A L, Korabelnicov A V, Kuchinskiy V V, et al. Fundamental techniques of the “ AJAX ” concept. modern state of research[R]. AIAA 200F1915.

[5] HOU Lingyun, FU Weibiao. A study on the mechanism of saving fuel consumption for emulsified fuel with wall catalytic reforming reaction[J]. Combustion Science and Technology, 2005, 177(4): 671-689.

[6] 覃川,傅维标. 催化重整反应对烃类燃料燃烧影响的研究[D]. 北京:清华大学, 1999.
QIN Chuan, FU Weibiao. Research on effect of catalytic reforming reaction on combustion of hydrocarbon[D]. Beijing: Tsinghua University, 1999. (in Chinese)

[7] 卢小丰. 催化重整反应在超燃冲压发动机燃气发生器中的研究[D]. 北京:清华大学, 2006.
LU Xiaofeng. Study on the gas generator of scramjet about catalytic reforming reaction[D]. Beijing: Tsinghua University, 2006. (in Chinese)