

火电厂SCR脱硝系统大规模数值模拟研究进展

● 李德波 冯永新 廖永进 曾庭华

广东电网有限责任公司电力科学研究院 广州 510080

摘要：

选择性催化还原法（SCR）是当下最为成熟且应用最为广泛地的电厂脱硝技术。由于实验研究过程复杂、实验周期长，单纯的实验研究已经难以满足脱硝系统变负荷、多工况下的分析。因此，采用计算流体力学软件对SCR脱硝特性进行数值模拟成为当下研究的热门，本文在总结国内外大量资料的基础上，对数值模拟在脱硝方面的应用进行分类总结，阐述了目前国内外关于脱硝反应动力学模型及流场等方面模拟的研究内容，分析探讨了SCR脱硝研究的主要方向以及优化SCR脱硝设计的方法。

关键词：选择性催化还原，脱硝，数值模拟，反应动力学

引言

近年来随着工业不断发展，NO_x排放量的不断增加，酸雨已由硫酸型向硫酸、硝酸复合型转变^[1]。NO_x逐渐成为主要的大气污染源，而燃煤电厂由于其排放量较高，成为未来大气治理的主要对象。对于燃烧煤粉的电站锅炉，其污染物氮氧化物排放主要是NO和NO₂，其中的NO约占90%以上，因此通常将NO和NO₂总称为NO_x。

近些年来，在对NO_x污染的控制方面政府及科研单位做了大量的研究工作，并且开发出了许多实用的新技术。按照氮氧化物在燃烧时的控制阶段的不同，其减排技术最常用技术一般分为三类：燃烧前、燃烧中和燃烧后的烟气脱硝。燃烧中控制的手段主要为采用低NO_x燃烧器、燃料混合、分级燃烧等。燃烧后脱硝的措施包括选择性催化还原法(SCR)、选择性非催化还原法(SNCR)、炽热碳还原法、湿式络合吸收法、电子束照射法和等离子体法以及微生物法等^[2]。当下最主流的脱硝技术包括SCR和SNCR两种。对于SNCR技术，当反应温度低于900 K时会造成氨穿透的现象，所以对反应温度控制要求比较高。SCR法是目前国际上应用最为广泛的高效烟气脱硝技术，技术成熟、不形成二次污染、且运行可靠、便于维护，最适合大力推广^[3]。

1. SCR脱硝系统数值模拟

SCR烟气脱硝系统的效率不仅与所选催化剂的活性有关^[4]，而且与整个脱硝系统流场、温度场、烟

气组分分布及喷氨调整有关。由于数值模拟技术的飞速发展所带来的便捷性和经济性，使的数值模拟在SCR脱硝系统方面的研究得以深入开展。目前，数值模拟技术在SCR烟气脱硝技术中的应用主要包括：1、SCR系统部件布置模拟研究；2、SCR脱硝系统内组分分布及反应模拟研究。通过模拟SCR系统内部部件如：导流板、整流器及催化剂布置，可以在最短的时间内得到大量关于流场、飞灰冲刷等数据从而获得最优的布置方式；而对于烟气组分及反应的模拟可以得到实验短时间内无法得到的大量信息，为催化剂的运行监测提供数据支撑。目前关于SCR脱硝系统的模拟最大的困难在于两点：1、催化剂表面及内部的反应复杂性以及组分反应与流动传热的耦合；2、电厂实际变工况运行时流场的多变性。因此，更加全面综合的数值模拟方法有待进一步的研究。

2. 反应动力学模型研究

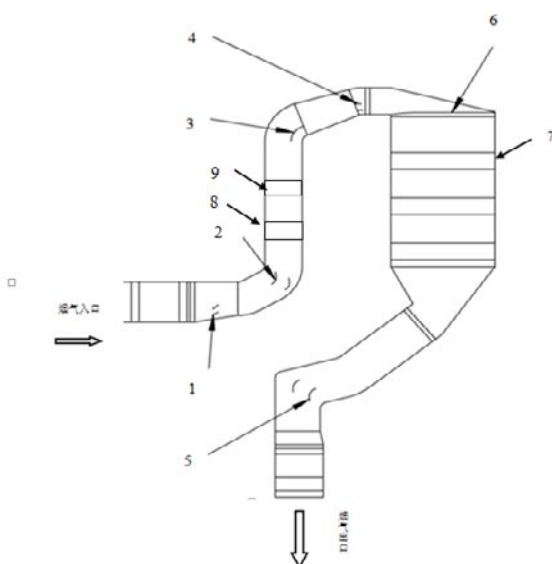
SCR 脱硝催化反应是较为复杂的气固非均相反应，包括表面反应和内部反应两部分。整个反应过程通常包括三部分：1、组分扩散到催化剂表面；2、反应组分吸附在催化剂表面并发生反应；3、反应生成物脱附^[5]。目前学术界普遍认可的SCR脱硝催化反应的机理主要为一下两种：第一种是Langmuir-Hinshelwood (L-H) 机理，认为主反应发生在温度低于200 K，且在反应发生时，NH₃和NO同时扩散到催化剂表面，然后同时吸附在催化剂表面相邻的活性反应位上进行反应。第二种是 Eley-Rideal (E-R)

机理,认为主反应发生温度高于200 ,且在反应是 NH_3 先扩散到催化剂表面并被吸附在催化剂,然后再与NO发生反应。也有人认为随着温度窗口的扩大,两种机理可能同时存在^[6]。对于目前火电厂普遍应用的蜂窝式钒基催化剂,研究认为,E-R模型机理更符合实际情况。

在(L-H)机理和(E-R)机理的基础上,学者进行了进一步的研究分析。文献[7]中以E-R机制为动力学基础,建立了SCR催化剂单孔道一维数学模型,用于模拟SCR催化剂孔道内的反应进程。模型同时还考虑了氨氧化的副反应以及孔道内反应的热效应。利用模型计算了孔道内的浓度和温度分布、不同运行参数对NO转化率的影响,以及催化剂孔通道大小与孔形状对脱硝效率的影响。廖永进等^[8]采用E-R机制建立的速率方程对实验数据进行回归,得到了典型催化剂服役前后的表观动力学参数,并分析了催化剂失活的原因。研究表明:催化剂服役前的 NH_3 平衡速率常数的表观活化能和表观指前因子均比服役后增大。Tronconi等^[9]以常用的钒钛基催化剂为研究对象进行研究,通过研究反应温度窗口发现,温度在200 以上时催化反应主要为E-R反应机理,温度在200 以下时催化反应主要为L-H反应机理。

3. SCR系统部件模拟

在SCR脱硝系统实际运行中,喷氨合理性脱硝效率达标在很大程度上依赖于反应系统的流场及温度场的均匀性^[10],而这又取决于系统内装置如:导流板、整流器及催化剂的布置形式(如图1)。



1-5反应器内导流板;6整流器;7催化剂层;8喷氨格栅;9混合器

图1 SCR系统图

3.1 导流板优化数值模拟

脱硝烟道内构件的合理布置有利于烟道内流场的均匀化。对于SCR脱硝系统来说,其流场的均匀性等都有赖于烟道内导流板的布置,将导流板合理的布置在烟道扩口处、烟道上升拐弯部位以及整流器上部可以很好地保证流场均匀性,减少脱硝系统由于烟道不均导致的磨损、积灰等。

在导流板优化设计布置方面,李德波在现场运行优化^[11]的基础上,采用三维稳态计算和SIMPLE算法,进行数值模拟研究^{[12][13]},对某燃煤机组SCR脱硝系统进行烟气流场均匀性和飞灰沉积的综合数值模拟。在加入飞灰颗粒离散相后,开展烟道内导流板结构以及导流板布置形式对SCR反应器内流场以及飞灰沉积的影响研究。结果表明:导流板的弧形板后加装一段竖直直板可进一步引导烟气流动,减小回流作用,烟气进入上层催化剂层时速度更加均匀,同时经过多工况ONI后的综合分析考虑,给出了常规运行下优化布置的方案。LiMao等^[14]以某600MW超临界锅炉为研究对象,利用数值模拟研究导流板布置方式。在模拟过程中,通过在脱硝系统烟气入口处(图1中1处)加装2块导流板,在脱硝系统上升弯道处(图1中2处)加装5块导流板,在整流器(图1中3处)上方加装9块导流板,达到了优化烟道流场的目的。在完成导流板布置位置模拟研究后,进行优化设计,还对导流板间距进行优化设计,保证了最佳的烟气分布。

徐妍,李文彦^[15]以某电厂300MW机组SCR脱硝反应器中导流板为研究对象,采用FLUENT软件,应用k- ϵ 双方程模型计算气体的湍流运动,采用物质输运方程预测烟气组分的混合,研究反应器原设计方案下的速度场和浓度场信息,通过模拟五种不同的烟气流速及四种不同结构的导流板下反应器内流场的数值模拟。通过多种方案的对比分析,得出最优的导流板结构及反应器内流场分布。文献[16]采用Fluent对SCR脱硝系统烟道弯道处4种导流板设置方案进行了模拟,通过对烟道内速度分布图和烟道进出口压力下降的分析,探讨了导流板布置方式对脱硝烟道出口速度分布、进出口压差及流动过程能量损耗的影响,得出以下结论:在脱硝烟道中设置导流板,可以显著改善烟道内流场的分布。合理的导流板设计不仅能使流速变得均匀,而且还可以降低烟道的能量损失和压降。但是,当导流板设计结构尺寸过大时,虽能很好的改善流场,但因其本身影响使其对流体阻力的增大,将导致烟道的能量损失和压降增大。而作者^[17]认为脱硝反应器内流场均匀性取决于催化剂床层顶部导流板的性能。通过改变导流板间距、导流板长度、与Z轴的夹角(垂直轴)以及第1块导流板距反应器

边壁的距离,对烟气整流格栅进行模拟,从而分析烟气整流格栅结构参数对反应器流场分布的影响。

3.2 导流板及喷氨系统综合模拟

通过合理的设置烟道内导流板的位置可以改善烟道内流场的分布,但是由于SCR烟道流场的复杂性,需要对导流板以外的喷氨格栅、混合器等进行综合优化,才能达到实际运行需要的准确度^[18]。

由SCR脱硝机理可知, NH_3 在脱硝中起到重要的作用^[19], 喷氨量、喷氨均匀性及氨氮摩尔比的变化将直接影响到脱硝效率高低。文献[20]选取实际的脱硝反应器为研究对象,以分析脱硝系统中烟气反应物组分浓度分布不均匀性对SCR脱硝性能影响为目的,进行了数值模拟分析。数值模拟结果表明,烟气中喷氨分布的不均匀性对脱硝装置的脱硝效率和氨逃逸有显著影响。孙虹^[21]以某1000MW电站锅炉SCR脱硝系统为研究对象,对脱硝反应器内的多组分分布、湍流流动及化学反应进行数值计算研究。利用数值模拟多次试算获得最优喷氨策略,并对该最优喷氨策略进行现场验证,现场验证实验表明,可有效地指导喷氨优化调整,降低调整盲目性,提高现场工作效率。周丽丽^[22]考察了未加静态混合器、多孔板以及导流板的空白模型和优化模型的数值模拟结果,结果表明:加入静态混合器、多孔板以及导流板的优化模型中混合气体的速度变化幅度明显减小,在一定的区域内速度分布均匀;有效改善SCR系统中混合气体的流动方向,减小回流区域。

3.3 催化剂相关模拟

催化剂作为SCR烟气脱硝技术的核心工艺,是保证电厂脱硝效率的关键所在,但是由于其工艺布置位置和煤质的影响,容易造成催化剂中毒、磨损的问题,造成催化剂活性下降。而数值模拟作为一种重要工具,对研究催化剂运行有重要的意义。

徐秀林等^[23]采用Ansys Workbench对催化剂端面和孔壁磨损进行了数值模拟研究,分别讨论了催化剂孔径、布置间距及空岛堵塞对催化剂运行中磨损的影响,揭示了催化剂磨损的规律;安敬学^[24]以国内某600MW超超临界锅炉脱硝系统催化剂为研究对象,利用数值模拟研究了飞灰颗粒场的不均匀分布对催化剂磨损的影响,同时提出了包括加装导流撞击装置在内的六种不同的改造方案,显著提高了脱硝系统运行的可靠性。在催化剂种类方面,东南大学的刘涛^[25]利用Fluent模拟软件,利用实验数据得出的化学动力学参数,模拟蜂窝式、板式及波纹式催化剂阻力特性,结果表明使用蜂窝式催化剂效果最好。Kenji Tanno^[26]以蜂窝式催化剂为研究对象,采用

直接数值模拟对三种不同的流入条件:一个层流和两个湍流进行计算。结果显示以湍流方式进入流动区域时,脱硝效率明显高于以层流方式,且随着流动向下游移动时,流动方式由湍流转变为层流,所以在催化剂通道下游处脱硝效率降低。

4. 实验研究与数值模拟耦合研究

作为处于负荷变化运行中的SCR脱硝系统,单靠CFD数值模拟不能很好地满足实际运行和设计的需要,为了达到更好的数值模拟效果,需要将数值模拟和冷态物理实验台进行对比优化,才能更好的优化工程设计。

Hanqiang Liu^[27]结合多孔介质模型和组分输运方程,对1000MW燃煤站的SCR系统进行了数值模拟,得到了不同情况下的速度场和浓度场。结果表明:安装了角叶片叶栅和整流格栅,在反应器内催化剂入口处的烟气速度不均匀性小于15%。在最佳流场的前提下,涡流混合器可以确保反应器中氨和烟道气的充分混合。通过冷模型试验验证数值模拟的可靠性,有效地指导SCR系统的设计;Yanhong Gao^[28]以600MW发电厂的SCR系统为研究对象,通过改变导板的位置和数量以及混频器的形状进行数值模拟研究。研究结果表明:使用板式导板和盘式环形混合器,其流场均匀性效果更好。同时,随着氨氮比的增加,NOX的转化率从67%增加到96%,但随着速度的增加从98%降低到82%。催化剂床入口处的速度分布和 NH_3 泄漏的减小,可以满足需求工程。上海海事大学徐圆圆等人^[29]使用Fluent6.3软件进行了300MW燃煤发电厂SCR脱硝系统三种不同导流板、整流格栅布置方式的模拟,得出改进后的SCR脱硝系统布置方式,确保催化剂入口速度均匀分布,得出混合器厚度为350mm,并通过1/12比例设计的冷态试验结果定性验证了数值模拟结果。

5. 结论

通过综述研究,认为反应动力学模型是SCR数值模拟的基础所在,根据催化剂的类型和电厂实际运行选择合适的机理进行模拟是数值模拟准确性的关键所在。而在实际运行中,SCR系统流场的模拟具有积极的意义,通过对SCR脱硝系统烟道内导流板、混合器等装置进行数值模拟,可以优化脱硝系统流场设计。因此,在常规SCR脱硝系统设计前期以及运行中,利用CFD软件对脱硝反应器内部流场及脱硝效果进行模拟分析是优化工程设计越来越重要的技术手段之一。

参考文献：

- [1] McMahon TJ, Moon RE, Luschinger BP, et al. Nitric oxide in the human respiratory cycle[J]. 2002, 8(7):711—717.
- [2] Nam IS. Modeling of Pulsed corona discharge process for the removal of nitric oxide and sulfur dioxide[J]. Chemical Engineering Journal, 2002, 85(1):87—97.
- [3] Forzatti P. Present status and perspectives in De-NOX SCR catalysis[J]. Applied Catalysis A: General, 2001, 222(1-):221-236.
- [4] 张强,杨世极. 某火电厂SCR脱硝催化剂运行状况与活性测试[J]. 热力发电,2010,04:62-66.
- [5] Siovall H, Blint R J, Olsson L. Detailed kinetic modeling of NH₃ SCR over Cu-ZSM-5[J]. Applied Catalysis B: Environmental, 2009,92(1-2):138-153.
- [6] Kijlstra W S, Brands D S, Smith I, et al. Mechanism of the selective catalytic reduction of NO with NH₃ over MnOX/A1203[J]. Journal of Catalysis, 1997, 171(1): 219-230.
- [7] 沈伯雄,赵宁,刘亭. 烟气脱硝选择性催化还原催化剂反应模拟研究[J]. 中国电机工程学报,2011,08:31-37.
- [8] 廖永进,陆继东,黄秋雄,等.选择性催化还原服役后催化剂活性及动力学实验研究[J]. 中国电机工程学报,2013,17:37-44+9.
- [9] Tronconi E, Cavanna A, Forzatti P. Unsteady analysis of NOX reduction over selective catalytic reduction - De-NOX monolith catalysts [J] Ind. Eng. Chem. Res., 1998, 37: 2341-2349
- [13] 冯晓鸣,廖永进,徐齐胜,曾庭华. 一种喷氨格栅优化调整试验技术应用[J]. 广东电力,2014,11:36-40.
- [11] 李德波,廖永进,徐齐胜,曾庭华. 电站锅炉SCR脱硝系统现场运行优化[J]. 广东电力,2014,05:16-19.
- [12] 李德波,徐齐胜,廖永进,曾庭华,等.SCR脱硝系统导流板优化数值模拟[J].广东电力,2014,07:1-5+40.
- [13] 朱天宇,李德波,方庆艳,陈刚.燃煤锅炉SCR烟气脱硝系统流场优化的数值模拟[J].动力工程学报,2015,06:481-488+508.
- [14] Li Mao,Hongjie,Zhou Jiemin.Numerical simulation and optimization of flow field in the SCR denitrification system[C]// International Conference on Energy and Environment Technology, China, 2009.
- [15] 徐妍,李文彦. SCR脱硝反应器导流板的结构设计[J]. 热力发电,2008,10:49-52+54.
- [16] 周志明,樊卫国,董立春.选择性催化还原脱硝系统烟道中导流板设计数值模拟[J].重庆大学学报,2009,10:1187-1192.
- [17] 汪洋,崔一尘,吴树志,高翔,岑可法. 脱硝反应器烟气整流格栅流场数值模拟研究[J]. 热力发电,2009,11:28-34.
- [18] 张文志,曾毅夫. SCR脱硝系统烟道内流场优化[J].环境工程学报,2015,02:883-887.
- [19] 成明涛,钟俊,廖永进,范军辉,高正阳. 基于流场多变的SCR脱硝系统喷氨优化调整试验[J].热力发电,2016,12:130-136.
- [20] 董建勋,李辰飞,王松岭,陈宏伟.还原剂分布不均匀对SCR脱硝性能影响的模拟分析[J].电站系统工程,2007,01:20-21+24.
- [21] 孙虹,华伟,黄治军,孙栓柱,余志健,段伦博. 基于CFD建模的1000MW电站锅炉SCR脱硝系统喷氨策略优化[J]. 动力工程学报,2016,10:810-815+821.
- [22] 周丽丽. 烟气脱硝反应器气体预分布器结构和混合性能研究[D].北京化工大学,2010.
- [23] 徐秀林. SCR蜂窝状脱硝催化剂磨损研究[D].浙江大学,2015.
- [24] 安敬学,王磊,秦淇,蓝晓村,程金武.电站锅炉脱硝系统催化剂磨损数值模拟[J].锅炉技术,2016,02:32-38+42.
- [25] 刘涛.SCR多元催化剂脱硝性能试验研究及数值模拟[D].东南大学硕士论文,2006,19-38.
- [26] Kenji Tanno,Ryoichi Kurose,Takenobu Michioka.Direct numerical simulation of flow and surface reaction in De-NOX catalyst[J].Advance Powder Technology 24(2013)879-885.
- [27] Hanqiang Liu,Tingting Guo,Yongping Yang,Guangjie Lu.Optimization and Numerical Simulation of the Flow Characteristics in SCR System[J].Energy Procedia 17(2012)801-812.
- [28] Yanhong Gao, Qingcai Liu, Lingtao Bian. Numerical Simulation and Optimization of Flow Field in the SCR Denitrification System on a 600 MW Capacity Units[J].Energy Procedia 14 (2012) 370-375
- [29] YuxnYuxn Xu, , Yan Zhang, Jingcheng Wang, JingQi Yuan.Application of CFD in the optimal design of a SCR - De - NOX system for a 300 MW coal - fired power plant Computers and Chemical Engineering; 49 (2013) :50 - 60