

粉煤燃烧与气化

L.D.Simone, D.T.Pratt 著

傅维林、卫景花 译

清华大学出版社

粉煤燃烧与气化

L.D. Smoot; D.T. Pratt 著

傅维标 卫景彬 译

清华

本书执笔者

Clayton T.Crowe: 华盛顿州, 波尔门, 华盛顿州大学机械工程系。

M.Duane Horton: 犹他州, 普罗伏, 杨伯翰大学化学工程系。

Philip C. Malte: 华盛顿州, 波尔门, 华盛顿州大学机械工程系。

David T.Pratt: 犹他州, 盐湖城, 犹他大学机械与工业工程系。

Dee P. Rees: 犹他州, 普罗伏, 杨伯翰大学化学工程系。

F. Douglas Skinner: 犹他州, 普罗伏, 杨伯翰大学化学工程系。

Philip J.Smith: 犹他州, 普罗伏, 杨伯翰大学化学工程系。

L.Douglas Smoot: 犹他州, 普罗伏, 杨伯翰大学化学工程系。

J. Rand Thurgood: 犹他州, 普罗伏, 杨伯翰大学化学工程系。

Sneh Anjali Varma: 犹他州, 盐湖城, 犹他大学机械与工业工程系。

John J. Wormeck: 犹他州, 盐湖城, 犹他大学机械与工业工程系。

序 言

过去在研究和分析粉煤工业炉、燃烧室、MHD 发电机以及其他反应器时，对于复杂的流动，化学反应的发生，所采用的技术曾主要依靠经验给定的输入参数，而对传热问题更是形式上进行处理。随着对于控制燃烧产生的污染问题所给予的关心程度的增长，就显得对于粉煤燃烧中有关的基础物理和化学机理缺乏了解。幸好，最近在计算机速度和容量方面，在对带旋涡的湍流进行数值计算预测方面，在两相流体力学方面，在带化学反应的流动方面，有了进展，创造了一个对于这种复杂的燃烧系统进行更详细地描述和模拟的可能性。我们相信，为了有可能对粉煤燃烧进行更基本的描述，许多必要的子模型是可以得到的，或者是目前就可以进行研究的。同时，随着煤的应用的快速增长，并且在美国把重点主要放在新的粉煤燃烧过程的研究上，所以，对于粉煤反应过程进行模拟的兴趣也有了显著增加。这种增加的兴趣已经为自 1976 年以后举行的 ERDA 煤的转换模拟会议所证实。这样的会议有 200 多个工业、政府和大学的代表参加。

在过去的六年中，我们一直在研究粉煤的燃烧过程。这一工作包括基本的实验量测和分析模型的研究。在我们的模拟研究工作中，试图发展以通用守恒方程为基础的基本模型，并且利用可得到的最好文献资料作为模型参数的来源。这本书的主要目的之一是提供出我们应用于粉煤系统的通用模型处理方法。这本书重点讨论了用气相输送细煤粉的处理方法。

一些特别引起兴趣的问题包括：粉煤工业炉和电厂的燃烧问题；气流携带式粉煤气化器燃烧和气化问题；MHD 发电机燃烧问题；以及煤的粉末和气体混合物的层流和湍流情况下的火焰传播问题。而其中许多原理和处理方法也可用于其他煤的转换和燃烧问题中，我们不考虑流化床、固定床或者在现场处理的燃烧和气化。另外，我们也不考虑涉及油页岩、焦油矿砂等其他矿物燃料的燃烧问题，即便是粉煤燃烧的许多方面与这些问题有关，也暂不予以考虑。

对于粉煤燃烧模型，我们将对模型的基础给以详细阐述。因此，本书的第Ⅰ和第Ⅱ部分重点在于描述反应、湍流或层流、多相系统的一般原理，研究并概括了一般的守恒方程。给出了在复杂的多相混合物中热化学平衡的计算基础，它必须与快速计算以及查阅必要的输入数据参数相结合。然后讨论了速率变化过程，它包括与湍流、化学动力学、辐射热、气体—颗粒的对流与扩散之间的相互作用等有关的问题。在第Ⅱ部分的许多地方还研究了描述这些复杂速率变化过程的一些参数和系数。书中这一部分对处理复杂反应流动系统提供了可供使用的推荐参数和系数的值。第Ⅰ和第Ⅱ部分作反应性流体的提高课将可能是很合适的。在写的过程中，也考虑了这种适用情况。

第Ⅲ部分对粉煤特性和速率变化过程进行了更专门的研究。对煤的结构和成份进行了一段描述之后，就研究了煤的热解和炭的氧化过程。接着研究了挥发份的气相燃烧和粉煤的污染等问题。最后，在本书这一部分完成了粉煤颗粒反应的一般模拟框架。第Ⅲ部分主要是建筑在重温和概括已经发表的文献的基础上的。这一部分还包括了为描述煤的反应的

重要速率问题所介绍的合理建议。

第IV部分对粉煤燃烧模型进行了详细描述。对这些模型，作者们已经进行了研究，也有的还正在研究之中。给出了在预混气体或多相层流中预示火焰传播的通用模型的资料。模型的预示值和气体—粉煤火焰的实验结果进行了比较。并且讨论了火焰传播机理。对于湍流中的火焰传播也作了简要的研究。

然后，阐明了通用的、一维粉煤燃烧和气化的模型。并且讨论了模型对于烧煤的工业炉和气流携带式气化器的预示情况，还与实验结果进行了比较。这个模型在系统分析和数据解释方面有着潜在的用处，但是不能预示煤的反应器内部各参数的多维变化情况。

最后，概要地描述了粉煤燃烧和气化过程的通用的、多维的模型，并且讨论了求解的方法。对于定常状态、二维情况的解进行了重点讨论。这一模型考虑了湍流、旋涡、多相、反应性流动等情况。

对于这种模型的结构和应用，作者们认识到有几个地方不精确。煤是很复杂的不均匀物质，它的结构和性质是高度变化的，并且还是不很了解的。煤的热分解和氧化取决于煤的种类、颗粒尺寸以及尺寸分布、温度的上升历程等等因素，因此，要对它进行概括就很困难。另外，湍流旋涡流、湍流反应流及湍流两相流的复杂问题，目前也还没有很充分地得到解决。仅仅是在最近才可对旋涡流进行正式计算，但是实验量测和模型预示比较的范围还受到很多限制。湍流模型中合适的通用参数还没有很好地确定。湍流与化学反应方面的相互作用甚至还没有任何研究。因此，要给出可靠地处理

这一复杂情况的通用计算技术，简直是不可能的。不准确性也与气体湍流对颗粒运动的影响有关。我们知道，无规则的气体脉动可以是使得颗粒扩散的主要动力，但是对于这一影响的处理还是处于初始阶段。最后，还有一点就是试图研究把这几种情况结合起来的一种模型。为此，就必须用实验量测值来进行比较，以便证实粉煤系统模型的有效性，为了使模型有效，仅有出口气体或炭组分或温度的测定值还是不够的，至少反应器内部的当地时平均参数剖面必须作为模型估算的基础。由于这种研究还正在进行之中，还在不断获得新的测量结果，因此本书中只能给出一些测量结果，这些结果和预示值进行了比较。这些测量包括：煤—空气预混层流火焰及甲烷—空气预混层流火焰的数据；气体携带式气化器及工业炉中气体和炭的组分的空间分布测量数据；此外对于充满颗粒的无化学反应的带回流的射流剖面的量测有的已经得到数据，有的还在测试之中。这些量测值与模型预示相比较，得出结论是，可以允许对没有化学反应的复杂条件下的颗粒—气流相互影响进行估算。

因为对粉煤燃烧高度地感兴趣，又因为在这一领域内研究工作正在扩展，所以，可以预料在未来的几年内，与本书内容有关的一些重大的新增加的结果将不断发表。我们也可以预见到必然对书中的一些资料进行补充、修改或者改变。然而，我们希望，在对粉煤燃烧和气化过程进行模拟研究（也许还没有很好研究）有高度兴趣的时候，本书的出版能成为一种有用的尝试。

本书的许多工作得到了美国政府和工业部的支持。我们特别表示对美国资源局（United States Bureau of Mines）、

美国匹兹堡资源局和安全保险研究中心 (Pittsburgh Mining and safety Research Center)、美国能源部 (United States Deyartment of Enargy)、矿物能源局 (Fossil Energy Division)、电站研究院、(Electric Power Research Institute)、矿物燃料局 (Fossil Fuels Division) 的感谢，以及对为了粉煤系统的实验和模型发展签订合同或给予支持帮助的国家科学基金会 (National Science Foundation) 的感谢。我们同时感谢杨伯翰大学化学工程系和研究所在准备文件资料上给予的帮助。我们也很感谢 Elaine Alger, Michael King 和 Scott Folster 对于稿子的打印和插图的准备所做的工作。最后，我们感谢几位参加工作的作者，包括几位教授和哲学博士研究生，他们进行了文献的搜集和分析工作，准备了本书的资料，花费了他们许多时间。本书的作者主要是在杨伯翰大学和犹他大学从事粉煤研究的人。M.D.Horton 教授是美国资源局研究矿山爆炸的一位高级研究员。Dee P. Rees 和 J. Rand Thurgood 是从事 EPRI 粉煤燃烧研究的化学工程哲学博士研究生。而 F.Douglas Skinner 是从事 DOE 携带式粉煤气化研究的哲学博士研究生。华盛顿国立大学的 Clayton T. Crowe 和 Philip C.Malte 教授是这一工作的顾问。Sneha Anjali varma 是 Utah 大学机械工程方面的哲学博士研究生，他在从事 EPRI 研究工作。Dr.John Wormeck 是关于 DOE 模型研究的一位高级研究工程师。

L.Douglas Smoot

David T.Pratt

目 录

第 I 部分

多相流动系统的基础

第 1 章 多组分平衡态	3
1. 均匀的气相平衡态	3
1.1 吉布斯函数最小值法	4
1.2 极值方程的 Newton-Raphson 解	6
2. 凝聚相	11
3. 热化学性质	13
4. 计算技术	14
5. 推荐方法	16
6. 符号	17
7. 参考文献	19
第 2 章 多组分守恒方程	20
1. 雷诺输运定理	20
2. 连续方程	24
2.1 气相组分的连续方程	24
2.2 在气体—颗粒混合物中的气相连续方程	27
2.3 分散相连续方程	29
2.4 总体连续方程	30
3. 动量方程	30
3.1 气相动量方程	30

3.2 在气体—颗粒混合物中的气相动量方程	33
3.3 分散相动量方程	35
3.4 整体的动量方程	37
4. 能量方程	38
4.1 气相能量方程	38
4.2 在气体—颗粒混合物中的气相能量方程	42
4.3 分散相能量方程	45
4.4 总体能量方程	51
5. 控制方程提要	51
6. 控制方程的宏观形式	53
6.1 连续方程	54
6.2 动量方程	55
6.3 能量方程	58
7. 输运系数	61
7.1 技术基础	62
7.2 输运系数方程	64
8. 符号	70
9. 参考文献	74

第Ⅱ部分

速率变化过程

第3章 湍流	78
1. 湍流特性	78
2. 雷诺方程组及其封闭问题	79
3. 湍流模型	81

3.1 平均速度场封闭问题.....	81
3.2 平均湍流能量封闭问题.....	83
3.3 平均雷诺应力封闭问题.....	85
3.4 湍流系数.....	86
4. 推荐方法	86
5. 符号	87
6. 参考文献	88
第4章 气相化学动力学.....	90
1. 均相反应速率表示式	90
2. 非均相反应速率表示式：关联指标	92
3. 湍流燃烧模型	95
3.1 模型1 局部均相有限化学反应速率模型...	96
3.2 模型2 化学平衡条件下有限速率的微观混合模型.....	97
3.2a 关联指标的估算	101
3.2b 对于粉状燃料的改进研究	102
3.3 模型3 聚合或分离模型，或称 “Monte Carlo”模型	103
4. 推荐的方法	104
5. 计算方法	104
5.1 化学动力学校正方程的解.....	107
5.2 初始的估算值.....	108
6. 符号	111
7. 参考文献	113
第5章 粉煤火焰中的辐射传热.....	115
1. 历史背景	115

2. 在工业炉中的传热	116
3. 辐射的基本概念	117
3.1 辐射	117
3.2 强度	117
3.3 发射系数	119
3.4 吸收系数和散射系数	120
4. 颗粒散射光学	123
4.1 颗粒尺寸参数	125
4.2 颗粒形状参数	126
4.3 折射系数	126
4.4 角散射截面	127
4.5 总散射截面	127
4.6 散射效率因子	127
4.7 吸收效率因子	128
4.8 散射系数和吸收系数	129
5. 辐射传递方程	129
6. 问题的简化	130
7. 辐射传递方程的解	132
7.1 Hottel 的区域法	133
7.2 Monte Carlo 法	133
7.3 扩散近似法	133
7.4 通量法	134
8. 辐射组分光学和辐射性质	135
8.1 光学性质	135
8.2 平衡温度	138
8.3 平均射线长度	138

8.4 边界条件	139
9. 符号	140
10. 参考文献	143
第6章 气体—颗粒流动	147
1. 颗粒的扩散	147
2. 颗粒阻力	151
2.1 稳态气动阻力	151
2.2 浮力	154
2.3 虚假质量效应	155
2.4 Basset 力	156
2.5 Magnus 效应	156
2.6 Saffman 升力	157
3. 气体—颗粒传热	158
3.1 气体和颗粒之间的对流传热	158
3.2 辐射传热	159
4. 气体—颗粒间的传质	160
5. 符号	160
6. 参考文献	163

第Ⅲ部分

煤的特性和反应速率

第7章 煤的一般性质	168
1. 煤的形成和变化	168
2. 煤的分类	170
3. 煤的物理和化学性质	171

4. 参考文献	181
第8章 快速热分解.....	182
1. 引言	182
2. 实验结果	183
2.1 实验方法.....	184
2.2 数据.....	184
3. 热分解模型	193
3.1 一般的简化假设.....	193
3.2 动力学模型.....	194
4. 提要	197
5. 符号	198
6. 参考文献	199
第9章 炭以及碳的非均相反应.....	203
1. 引言	203
2. 炭与氧气的反应	207
3. 炭与二氧化碳的反应	212
4. 炭与水蒸汽的反应	217
5. 炭与氢气的反应	221
6. 符号	223
7. 参考文献	224
第10章 挥发份的燃烧	229
1. 引言	229
2. 甲烷的氧化反应	231
3. 其他碳氢化合物的氧化反应	233
4. 总体反应	235
5. 建议	237

6. 符号	244
7. 参考文献	245
第11章 粉煤燃烧时污染物质形成的机理和动力学 ...	249
1. 引言	249
2. 碳黑微粒(Soot)	250
3. 含氮的污染物质	252
3.1 大气中的固定氮气.....	253
3.2 燃料氮.....	256
3.2a 结构和释放	256
3.2b 气相化学动力 学.....	261
4. 无机物形成的污染	266
4.1 煤灰的特性和矿物学.....	266
4.2 飞灰形成的机理.....	269
4.3 氯和强碱金属.....	273
5. 含硫的污染物	274
5.1 结构和释放.....	275
5.2 气相化学动力学.....	278
6. 在气化器中的污染	281
6.1 燃料氮的气化.....	282
6.2 无机物和颗粒物质.....	284
6.3 燃料硫的气化.....	284
6.4 提要.....	285
7. 符号	286
8. 参考文献	287
第12章 粉煤反应过程的模拟 ...	296
1. 一般探讨	296

2. 粉煤的模型方程	302
2.1 煤的反应速率	302
2.1a 煤脱去挥发份的反应	302
2.1b 碳的氧化	304
2.2 碳氢化合物的氧化	305
2.3 水份的蒸发	306
2.4 气体—煤颗粒之间的输运速率	306
2.4a 对流—导热传热	306
2.4b 对流—扩散传质	308
2.5 混合气的性质	309
2.6 煤的物理性质和参数	311
3. 符号	314
4. 参考文献	316

第IV部分

煤转换过程的数学模拟问题

第13章 一维系统的模型	322
1. 粉煤—空气火焰的传播	322
1.1 背景	322
1.2 模型的假设和方程组	324
1.3 辅助方程	327
1.4 求解技术	329
1.5 预示结果与实验测量结果的比较	330
1.5a 气相系统	331
1.5b. 煤—空气系统	331

1.6 传播机理	337
1.7 湍流火焰	339
2. 粉煤的燃烧与气化	345
2.1 引言	345
2.2 模型的基础	345
2.3 模型方程	347
2.4 求解方式	351
2.5 预示值与实验结果的比较	352
2.6 其他的粉煤燃烧和气化模型	354
3. 符号	355
4. 参考文献	359
第 14 章 多维系统的模型	363
1. 通用粉煤反应器模型	363
1.1 引言	363
1.1a 湍流混合模型	364
1.1b 气相化学动力学部分	365
1.1c 两相流动部分	365
1.1d 辐射部分	365
1.1e 煤的反应部分	366
1.1f 混合气性质	366
1.2 总体结构	366
1.3 Eulerian 方程（气相）	363
1.3a 流体力学方程组	372
1.3b 热化学方程组(CHEM)	375
1.4 Lagrangian 方程组（固相）	379
1.4a 控制方程组	373