

DOI: 10.11949/j.issn.0438-1157.20181129

乙烯裂解炉耦合模拟中湍流模型的影响分析

倪城振¹, 杜文莉^{1,2}, 胡贵华²

(¹ 华东理工大学信息科学与工程学院, 上海 200237; ² 华东理工大学化工过程先进控制和优化技术教育部重点实验室, 上海 200237)

摘要: 配备底部烧嘴和侧壁烧嘴的乙烯裂解炉应用越来越广泛, 不同燃烧模式影响着炉膛内湍流流动状态, 考虑到裂解炉中湍流流动与燃气喷料、燃烧和传热有较强的非线性耦合作用, 为此探究不同湍流模型在裂解炉/反应器耦合模拟中的影响对于裂解炉的精确设计和优化至关重要。针对不同湍流模型对某十万吨工业乙烯裂解炉进行了耦合模拟, 利用CFD数值模拟对采用标准 $k-\varepsilon$ 模型、RNG $k-\varepsilon$ 和Realizable $k-\varepsilon$ 模型所建立的湍流流动模型进行评估。将三种湍流模型的模拟结果与工业数据进行比较, 重点分析了裂解炉内的速度、温度、湍流能力等参数的分布情况, 表明Realizable $k-\varepsilon$ 模型在火焰稳定性、反应效率等方面优于其他两种模型, 且基于Realizable $k-\varepsilon$ 湍流方程的反应管模型在热通量、炉管外壁温度分布计算结果更接近实际工况。

关键词: 湍流; 计算流体力学; 数值模拟; 乙烯裂解炉; 反应器耦合

中图分类号: TQ 021.1; TE 963

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (2019) 02-0450-10

Impact of turbulence model in coupled simulation of ethylene cracking furnace

NI Chengzhen¹, DU Wenli^{1,2}, HU Guihua²

(¹ School of Information Science and Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China;

² Key Laboratory of Advanced Process Control and Optimization Technology of Ministry of Education, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: The ethylene cracking furnace equipped with the bottom burner and the side wall burner is more and more widely used. Different combustion modes affect the turbulent flow state in the furnace. Considering the turbulent flow in the cracking furnace and the gas injection, the combustion and heat transfer are strong. The nonlinear coupling effect, for this purpose, explores the influence of different turbulence models in the cracking furnace/reactor coupling simulation is critical for the precise design and optimization of the cracking furnace. In this paper, a coupling simulation for a 100000 t industrial ethylene cracking furnace was carried out for different turbulence models. The turbulent flow model established by the standard $k-\varepsilon$ model, RNG $k-\varepsilon$ and Realizable $k-\varepsilon$ model was evaluated by CFD numerical simulation. The simulation results of the three turbulence models are compared with the industrial data. The distribution of velocity, temperature and turbulence capacity in the cracking furnace is analyzed. The results show that the Realizable $k-\varepsilon$ model is superior to the other two models in flame stability and reaction efficiency. And based on the Realizable $k-\varepsilon$ turbulence equation, the calculation results of the heat flux and the outer wall temperature distribution of the furnace tube are closer to the actual working conditions.

收稿日期: 2018-10-08 修回日期: 2018-10-26

通信作者: 杜文莉(1974—), 女, 博士, 教授, wldu@ecust.edu.cn

第一作者: 倪城振(1994—), 男, 硕士研究生, 779893036@qq.com

基金项目: 国家杰出青年科学基金项目(61725301); 国家自然科学基金重点项目(61333010); 中央高校基本科研业务费资助(22221817014); 上海市自然科学基金项目(17ZR1406800)

引用本文: 倪城振, 杜文莉, 胡贵华. 乙烯裂解炉耦合模拟中湍流模型的影响分析[J]. 化工学报, 2019, 70(2): 450–459

Citation: NI Chengzhen, DU Wenli, HU Guihua. Impact of turbulence model in coupled simulation of ethylene cracking furnace[J]. CIESC Journal, 2019, 70(2): 450–459

Key words: turbulent flow; CFD; numerical simulation; cracking furnace; reactor coupling

引言

目前,配备底部烧嘴和侧壁烧嘴的裂解炉在乙烯生产的化工装置得到越来越多的应用^[1]。一般工业情况下,裂解炉中底部烧嘴的燃烧是未预先混合的,而侧壁烧嘴的燃烧是预先混合的,这对炉膛内湍流流动状态存在很大影响。乙烯裂解炉与反应器内的过程都呈强耦合关系^[1-2],裂解炉辐射段发生的反应过程将影响其模型性能。乙烯裂解炉内流动属于高 Reynolds 数湍流流动,其中发生的物理化学反应非常复杂,包括了燃烧、传热与组分输运等过程,湍流流动与燃气喷料、燃烧和传热有较强的非线性耦合作用。乙烯裂解炉的燃烧效率、燃烧稳定性、出口温度场、NO_x排放量、可靠性及寿命与湍流流动密切相关。衡量一个湍流模型的优缺点就是其能否对实际工况下的裂解炉与反应器的耦合结果进行准确的数值模拟^[3]。

乙烯裂解炉内的实际燃烧过程几乎都是湍流燃烧,燃烧过程湍流流动过程和化学反应有着强烈的相互作用。其中有两种主要的化学反应流:一种是湍流条件下的快速化学反应(燃烧)及其相互作用的湍流反应流;另一种是湍流燃烧条件下的缓慢吸热化学反应及其相互作用的湍流反应流^[4]。在这种情况下,不同湍流模型的选取对裂解炉与反应器的耦合模拟结果有很大的不同。因为不同湍流模型控制方程中关于湍流脉动值的雷诺应力项处理不同,因此各个湍流模型的预测性能好坏是与所研究的问题有关的。因此,寻求对裂解炉性能有良好的预测性的湍流模型是正确模拟乙烯裂解炉的先决条件。

随着精确模型的发展和不断增长的计算能力,计算流体动力学(CFD)稳步发展成为化工行业重要且不可或缺的模拟工具^[5-7]。在过去的研究中,Habibi 等^[8]采用重整化群(RNG) $k-\varepsilon$ 湍流模型来模拟天然气炉内流场流动,采用离散坐标法(DOM)模型、涡流耗散概念(EDC)模型、P-1 模型和绝热模型进行比较,但也仅评估了裂解炉的不同辐射模型对预测反应管温度和炉内火焰结构的影响;Shin 等^[9]利用可实现的(Realizable) $k-\varepsilon$ 模型模拟了圆形射流火焰。在不同湍流模型的对比研究中,Arman 等^[10]用 LB 低 Reynolds 数模型及标准 $k-\varepsilon$ 模型计算了圆管

突扩区域及圆管内矩形截面环肋的对流换热;肖志祥等^[11]对比分析了三种不同湍流模型的模拟能力。但是以上学者研究均未针对乙烯裂解炉内的湍流现象开展研究,目前仍缺乏一种普适性好、模拟能力强的湍流模型。

目前 Fluent 软件提供了 Spalart-Allmaras、 $k-\varepsilon$ 、 $k-\omega$ 、雷诺应力 RSM 等多种湍流模型,每种模型均适用不同的工况^[12]。本文针对乙烯裂解过程,考虑到乙烯裂解炉炉内实际湍流流动过程的复杂性,寻求合适湍流状态表征模型,分析不同湍流模型的影响。通过对比评价了各湍流模型对乙烯裂解炉的适用性,分析不同湍流模型下的数值模拟结果,将模拟结果与实验结果进行比较,以确定适用于乙烯裂解炉的最佳湍流模型。

1 数学模型

本文工作利用不同的湍流模型对十万吨工业乙烯裂解炉进行了裂解炉/反应器耦合模拟。在裂解炉模型中,采用雷诺平均 Navier-Stokes(RANS)方程的可压缩公式来模拟烟气流量。标准 $k-\varepsilon$ 模型、重整化群 RNG $k-\varepsilon$ 模型和 Realizable $k-\varepsilon$ 模型用于湍流流动建模。为了考虑底部烧嘴燃烧,采用了非预混合燃烧机理,而前部和后部壁中的侧壁燃烧器采用的是预混燃烧机理,故采用涡流耗散概念(EDC)和详细的 GRI 3.0 化学反应机理结合的模型来模拟湍流燃烧^[13-15]。离散坐标 DO 模型用于计算炉内的辐射传热。使用加灰色气体模型(WSGGM)来计算烟气混合物的吸收系数^[16]。

1.1 湍流流动模型

如前所述,有必要采用精确的湍流模型。流体的湍流流动影响着流场的特征和燃烧速度,由于烟气流动紊乱,在炉内发生复杂的燃烧和传热过程,为了能够准确描述湍流中流体的流动状况,必须通过基本方程来确定流场的控制方程^[17]。当忽略密度脉动等脉动之间的关联时,均流控制方程式可表示为

连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho U_i) = 0 \quad (1)$$

动量方程

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_i U_j) = \frac{\partial p_{\text{eff}}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \mu_t \right) \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial U_l}{\partial x_l} \right) \right] \quad (2)$$

其中

$$p_{\text{eff}} = p + \frac{2}{3} \rho k$$

裂解炉中使用基于雷诺平均 Navier-Stokes (RANS) 方程描述三维可压缩流, 用 N-S 方程加上不同湍流模型是目前使用最广泛的湍流数值模拟方法。本文选择了基于 RANS 的三种不同的湍流模型, 即标准 $k-\varepsilon$ 模型、重整化群 RNG $k-\varepsilon$ 模型和 Realizable $k-\varepsilon$ 模型进行评估。

1.1.1 标准 $k-\varepsilon$ 模型 标准 $k-\varepsilon$ 模型是一个半经验公式, 采用了湍动能 k 和湍动能的耗散率 ε 偏微分方程的双方程模型。

k -方程

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho k U_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \rho \varepsilon \quad (3)$$

ε -方程

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \varepsilon U_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{1\varepsilon} G_k - C_{2\varepsilon} \rho \varepsilon) \quad (4)$$

标准 $k-\varepsilon$ 模型通过求解偏微分方程确定脉动特征速度与平均速度梯度的关系, 而且特征长度不是由经验确定, 而是以耗散尺度作为特征长度, 并由求解相应的偏微分得到。

1.1.2 RNG $k-\varepsilon$ 模型 RNG $k-\varepsilon$ 模型通过在大尺度运动和修正后的黏度项体现小尺度的影响, 此模型在耗散率 ε 的方程中附加了一个源项

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \varepsilon U_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{1\varepsilon} G_k - C_{2\varepsilon} \rho \varepsilon) - R \quad (5)$$

其通过修正湍流黏度系数来考虑平均有旋运动对湍流的影响, 减小了高剪切力区的湍流黏性^[18]。

1.1.3 Realizable $k-\varepsilon$ 模型 Realizable $k-\varepsilon$ 模型是对 RNG $k-\varepsilon$ 模型的修正, 其湍动黏度计算式中的系数 C_μ 采用式(6)计算

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_S U^* \frac{k}{\varepsilon}} \quad (6)$$

Realizable $k-\varepsilon$ 模型可有效处理管道内流动、含有射流和混合流的自由流动、带有分离的流动及边界层流动等问题, 故在本此裂解炉数值模拟中优先考虑。

1.2 湍流燃烧模型

本文采用涡流耗散概念(EDC)和详细的 GRI 3.0 化学反应机理结合的模型来模拟湍流燃烧。因裂解炉中底部烧嘴的燃烧是未预先混合的, 而侧壁烧嘴的燃烧是预先混合的, 故乙烯裂解炉需要更精确的燃烧模型。涡流耗散概念(EDC)模型能够在湍流流动反应中考虑详细化学反应机理, 是更精确的燃烧模型^[11]。它假定分子混合和随后的反应发生在 Kolmogorov 规模的小湍流结构中, 在该结构中动能被耗散成热量。在 EDC 模型中源项 R_i 被模型化为

$$R_i = \frac{\rho (\varepsilon^*)^2}{\tau^* (1 - \xi^{*3})} (Y_i^* - Y_i) \quad (7)$$

EDC 模型通过将物质传输方程(MTE)中的源项 R_i 模型化解决该方程, 来预测物质的局部质量分数, 因此可以预测在时间尺度上缓慢形成的物质如 NO_x 。

为了准确描述裂解炉内的燃烧现象以及预测 NO_x 形成, 需将详细的 GRI 3.0 反应机理与燃烧模型进行耦合计算。GRI 3.0 中包含 16 组分的 41 步甲烷燃烧骨干机理, 能详细准确地描述裂解炉内的燃烧过程。除此之外, EDC 模型能更加精确地追踪化学反应进程, 与湍流之间的相互作用更符合物理意义^[19-22]。

1.3 辐射模型

本文采用离散坐标法(DOM)求解辐射传输方程(RTE), 与其他辐射传热计算方法相比, DOM 简单、可靠, 特别适用于流量、燃烧和传热的耦合计算。同时也采用灰气体组分加权平均模型(WSGGM)计算烟气混合物的吸收系数^[12]。

2 模型建立

2.1 几何结构与操作条件

本文采用 FLUENT 软件对某厂 SL-II 型管式裂解炉进行数值模拟, 其裂解炉结构如图 1 所示, 炉子的尺寸和操作条件见表 1。

由于结构的相似性, 本文中模拟了工业裂解炉的六分之一。该炉采用两程分支变径炉管设计, 在整个炉子中有 24 个“U”型分裂线圈以垂直方式悬挂在炉膛的中心, 交错排列成两排^[23]。反应器为“4-1”型, 即四个入口管与单一出口管连接; 炉膛底部靠近两侧墙壁装配两排共 36 个底部燃烧器, 为非预混燃烧器, 每个燃烧器包括 5 个喷嘴, 主喷嘴布置在

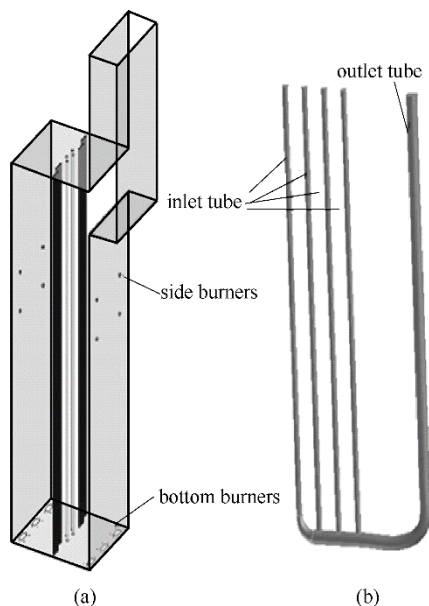


图1 SL-II裂解炉结构

Fig.1 SL-II cracking furnace structure

进风口中,其余辅助喷嘴布置在进风口四周;炉膛两侧墙壁上分别均匀布置了两排共48个预混燃烧器,用来辅助加热炉管。炉出口位于一排反应管的右侧。

2.2 边界条件

根据工艺参数确定底部和侧壁烧嘴的燃气进口流量、进风口流量以及反应管入口气体流量和温度。炉的出口为压力出口,其值为 -50 Pa 。反应管和炉墙壁面均采用无滑移假设,即壁面上各物理量的值均为0。由于结构的相似性,所以侧面的边界条件设为 symmetry。反应管的管外壁温度由COILSIM1D反应器模拟获得,并由用户定义函数(UDF)赋给管壁^[24]。进口湍流边界条件给定湍流强度 I (turbulence intensity),计算如下^[13]

$$I = 0.16(Re)^{-1/8} \quad (8)$$

2.3 炉膛模型与管内模型耦合模拟

由于向炉内供给的热量由炉式燃烧器供给,并且工艺气体与反应管外壁之间的温度差是传热的驱动力,所以蒸汽裂解炉的炉膛烟气侧和炉管工艺气体侧强耦合。由于反应管的热通量变化对炉管中的裂解反应和工艺气体温度曲线有影响,因此需要对反应管和炉膛中进行耦合模拟,以在整个装置中获得闭合的热平衡^[25-26]。因此,只有炉膛和反应管的耦合模拟可以准确预测湍流模型对关键工艺参数(如炉效率,反应管外壁温度和反应管热通量分布)的影响。本文采用炉膛CFD与反应管

表1 裂解炉结构尺寸和操作条件

Table 1 Cracking furnace structure size and operating conditions

Item	Parameters
furnace segment	
length (x-direction)/m	18.94
width (y-direction)/m	3.56
height (z-direction)/m	13.707
number of floor burners	36
number of wall burners	48
firing condition	
fuel gas flow rate in bottom/(kg/s)	1.2439
fuel gas flow rate in side/(kg/s)	0.2025
oxygen excess/(%) (vol)	2
fuel composition/(%) (mass)	
CH ₄	97.686
H ₂	0.516
CO	0.897
C ₂ H ₄	0.899
reactor coils	
number of reactor tubes	24
number of passes	2
inlet tube diameter/ $\times 10^3$ /m	64
outlet tube diameter/ $\times 10^3$ /m	121
thickness of tube/ $\times 10^3$ /m	6.5
feed rate/(kg/s)	11.11
steam dilution/(kg/kg)	0.6
coil inlet temperature/K	883
coil outlet pressure/kPa	206

COILSIM1D耦合进行仿真迭代计算,在第一次迭代中,在炉子模拟中采用工业测量的反应管外壁温度分布。然后通过程序模拟得到反应器管的模拟热通量分布,同时产生用于下一次裂解炉模拟的新的反应管外壁温度分布。重复该过程,直到多次连续迭代之间的管外壁温度的最大差异低于规定的预定阈值。

3 结果分析与讨论

本文分析了采用不同湍流模型对炉膛内烟气流量、湍流特性、NO_x排放量以及反应管的热通量分布、反应管外壁温度分布的影响,通过工业数据比较,确定了用于乙烯裂解炉的最佳湍流流动模型。

3.1 炉膛模拟

图2比较了不同湍流模型在垂直截面 $x=0.525\text{ m}$ 沿炉膛宽度方向不同高度的烟气 z 方向速度分布。

从图中可看出在底部烧嘴上方的速度比炉膛其他地方大,且在炉膛高1 m处,可清晰观察炉底燃烧器附近出现的喷射区,这些速度峰值随 z 的增加而减小。可以看出,使用不同湍流模型模拟得到的炉膛主燃区(1~9 m)速度沿宽度变化曲线趋势大体相同,但在两侧喷嘴处(10 m)速度相差较大。从图2(d)还可以看出标准 $k-\varepsilon$ 模型在两侧喷嘴处烟气速度较小,而RNG $k-\varepsilon$ 模型和 Realizable $k-\varepsilon$ 模型烟气速度较一致,造成这种问题的原因是侧壁燃料气的喷入增强了气流扰动,各个湍流模型对脉动量的处理不同。气流扰动对标准 $k-\varepsilon$ 模型影响较大,其预测湍流的恢复能力不如其他两种模型,显然RNG $k-\varepsilon$ 模型和 Realizable $k-\varepsilon$ 模型更符合实际工况。

图2还表明,在炉膛主燃烧区的底部烧嘴两侧出现了回流。在 $z=3$ m处,回流速度达到最大,为-2

m/s。当 $z=10$ m时,回流区域消失。回流增强了气流扰动,将火焰顶端的高温烟气带到炉膛底部,它促进了高温烟气与炉膛底部的低温烟气混合,从而导致炉膛里面的温度分布更加均匀。同时在回流区和顺流区之间气流湍流度很高而流速较低,使得气流速度接近于火焰传播速度,这为燃烧火焰的稳定和燃料气的连续点火提供了良好条件。

图3显示了不同湍流在垂直截面 $y=0.225$ m处沿炉膛长度的烟气温度分布。Realizable $k-\varepsilon$ 和 RNG $k-\varepsilon$ 模型模拟的温度场高温区、主燃区最高温度及出口温度的结果非常相似,而标准 $k-\varepsilon$ 模型模拟的温度场高温区较小。这是因为Realizable $k-\varepsilon$ 和 RNG $k-\varepsilon$ 模型为耗散率增加了新的传输方程,这使得它们能更精确地预测平板和圆柱射流的发散比率,使得其在侧壁烧嘴处有更加精确的预测。

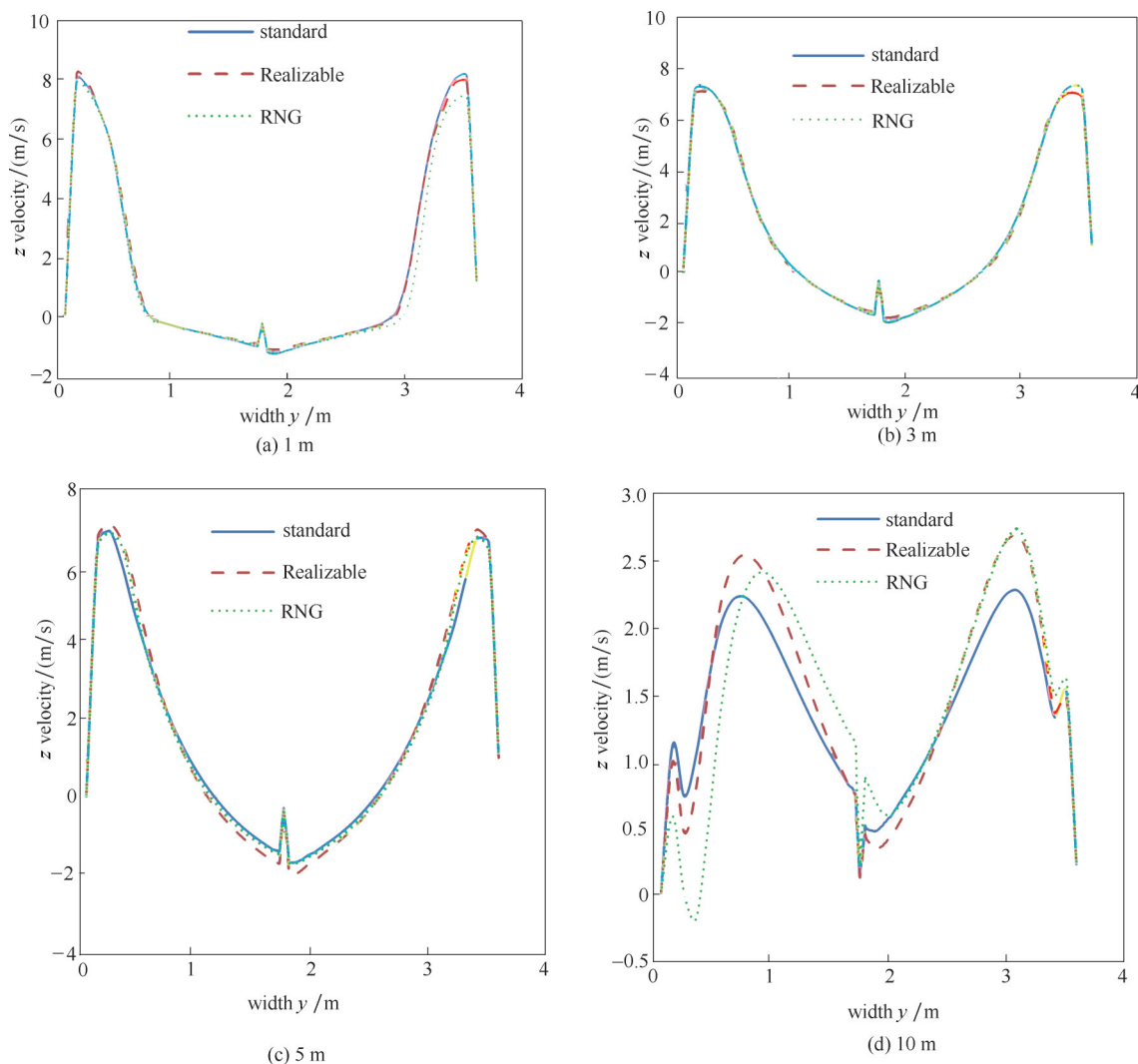


图2 湍流模型在截面0.525 m上沿炉膛宽度的不同高度处的烟气速度分布

Fig.2 Flue gas z -velocity component along width of furnace in plane 0.525 m at different heights

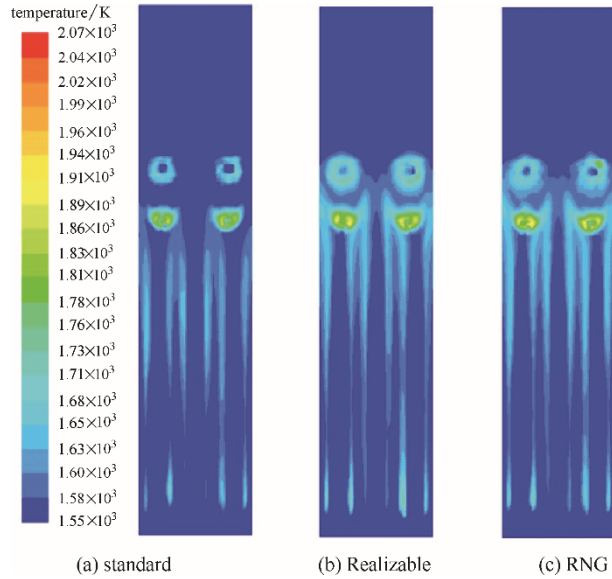


图3 不同湍流模型在截面0.225 m处温度分布

Fig.3 Temperature distribution of turbulence model in plane 0.225 m

图4给出了分别采用不同湍流模型截面 $x=0.525$ m 处的湍流强度分布。从图中可以看出,在炉膛主燃烧室、侧壁烧嘴及底部烧嘴处湍流强度较大。Realizable $k-\varepsilon$ 模型计算得到的平均湍流强度较大,RNG $k-\varepsilon$ 、标准 $k-\varepsilon$ 模型计算得到的平均湍流强度较小。湍流扰动会促使火焰形态发生变化,使火焰前锋阵面产生褶皱且变得粗糙。湍流强度越大,火焰面褶皱越多,火焰边界越模糊且越粗糙。湍流燃烧火焰面抖动而粗糙,会增大反应面积,促进已燃气体和未燃气体的迅速混合,缩短反应时间,提高热效率。

湍流黏度是指当流体流动处于湍流状态时,由于随机脉动造成的强烈涡团扩散和级联散列^[26],用来表示雷诺应力与平均速度之间的关系,表示为

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (9)$$

式中, k 和 ε 由解方程得到,经验常数 C_μ 在 RNG $k-\varepsilon$ 、Standard $k-\varepsilon$ 模型中取定值,在 Realizable $k-\varepsilon$ 模型中由式(6)得到。 μ_t 与流体黏度的比值即为湍流黏度比

$$\frac{\mu_t}{\mu} = \rho C_\mu \frac{k^2/\mu}{\varepsilon} \quad (10)$$

从图5、图6中可以看出,Realizable $k-\varepsilon$ 模型计算所得湍流动能 k 和湍流耗散率 ε 较大,这是因为其湍动黏度 μ_t 计算公式中引入了与旋转和曲率有关的内容^[27],其黏度系数 C_μ 由实际过程中的湍流动能 k 和湍流耗散率 ε 决定,这使得其比另两种采用

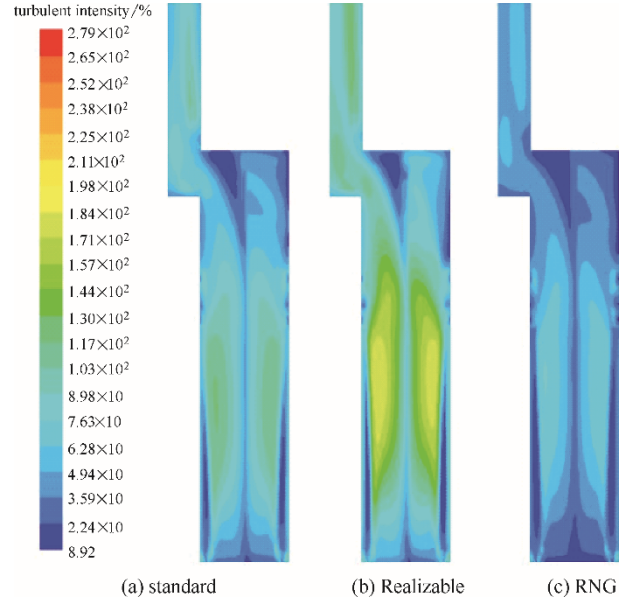


图4 不同湍流模型在截面0.525 m处湍流强度分布

Fig.4 Turbulence intensity distribution of turbulence model in plane 0.525 m

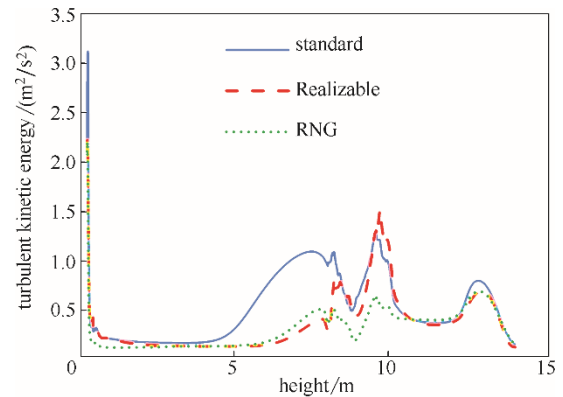


图5 不同湍流模型的湍流动能沿炉膛高度方向的变化

Fig.5 Turbulent flow energy of different turbulence models along height of furnace

常值 C_μ 的模型计算结果相对较大且准确。

从图7可看出使用 RNG $k-\varepsilon$ 模型计算所得的湍流黏度比较小,使用 Realizable $k-\varepsilon$ 模型计算得到的湍流黏度比最大。RNG $k-\varepsilon$ 模型在底部燃烧器及侧壁燃烧器处的湍流黏度比很小,其他两种模型在侧壁燃烧器处湍流黏度比较大,RNG $k-\varepsilon$ 模型计算得到的湍流黏度比与其他两种模型出现了不同,这是因为其比标准 $k-\varepsilon$ 模型在 ε 方程中增加了一项[式(5)],从而反映了主流的时均应变率^[28]。Realizable $k-\varepsilon$ 模型的湍流黏度计算公式不同,引入了与旋转和曲率有关的内容,在底部燃烧器及侧壁燃烧器处湍流黏度比计算中,其黏度系数 C_μ 由实际过程中的湍流动能 k 和湍流耗散率 ε 决定,更加符合实际

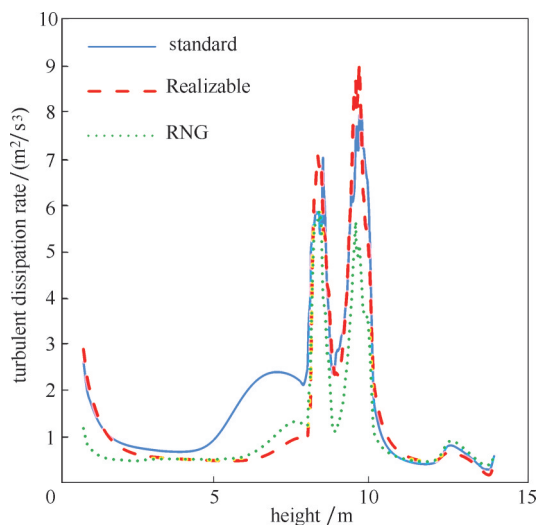


图6 不同湍流模型的湍流耗散率沿炉膛高度方向的变化

Fig.6 Turbulent dissipation rate of different turbulence models along height of furnace

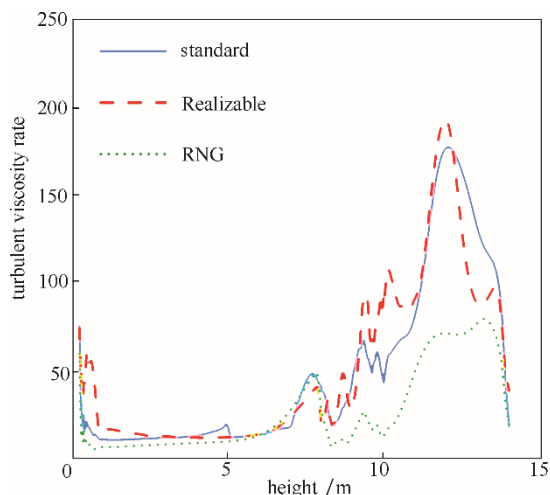


图7 不同湍流模型的湍流黏度比沿炉膛高度方向的变化

Fig.7 Turbulent viscosity of different turbulence models along height of furnace

工况。

图8、图9分别显示了三种湍流模型在垂直截面 $y=0.225$ m(即前壁燃烧器的中心)处沿着炉高度的NO质量分数分布。从图中可以看出,主燃区的NO生成率高,NO的浓度积累快。

从图9中可以清晰看出不同的湍流模型对氮氧化物的生成率有很大的影响,其中 Realizable 湍流模型在燃烧区 NO_x 的生成率最低且在炉膛出口处排放量最低,这表明适当增大湍流强度可以使主燃区和炉膛顶部温度更加均匀,进而有效降低烟气中NO的含量,这对实际工况下减少 NO_x 排放率具有指导意义^[29]。

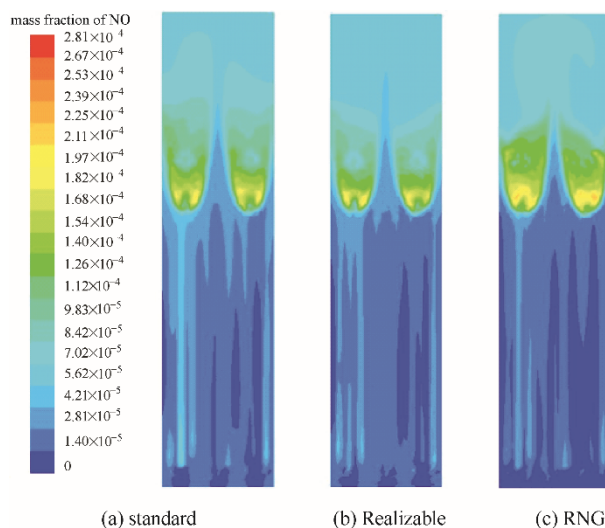


图8 不同湍流模型在截面0.225 m处NO质量分数分布

Fig.8 NO concentration distribution of turbulence model in plane 0.225m

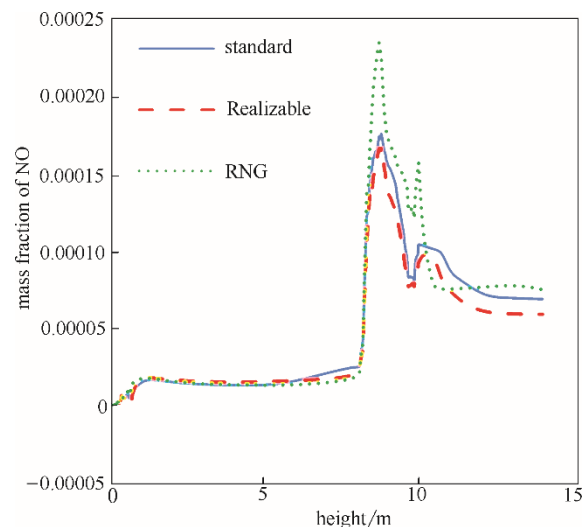


图9 不同湍流模型沿炉膛高度方向NO质量分数分布

Fig.9 Distribution of NO mass fraction along height of furnace in different turbulence models

3.2 反应管模拟

除了辐射换热,自然对流换热也是裂解炉内一种重要的换热方式,而湍流影响下,自然对流换热会出现湍流换热的特征,可通过 Prandtl 数来判断。湍流 Prandtl 数 Pr_t 是表达湍流流动与换热中动量扩散与热扩散相对大小的一个重要参数。由湍流扩散系数 α_t 和湍流黏性系数 μ_t 决定,公式如下

$$Pr_t = \frac{\mu_t}{\alpha_t} \quad (11)$$

图10显示了在开始运行的条件下,管外壁热流量和管外壁温度沿反应管长的分布。如图10(a)所示, Realizable $k-\varepsilon$ 模型和 RNG $k-\varepsilon$ 模型的热通量分

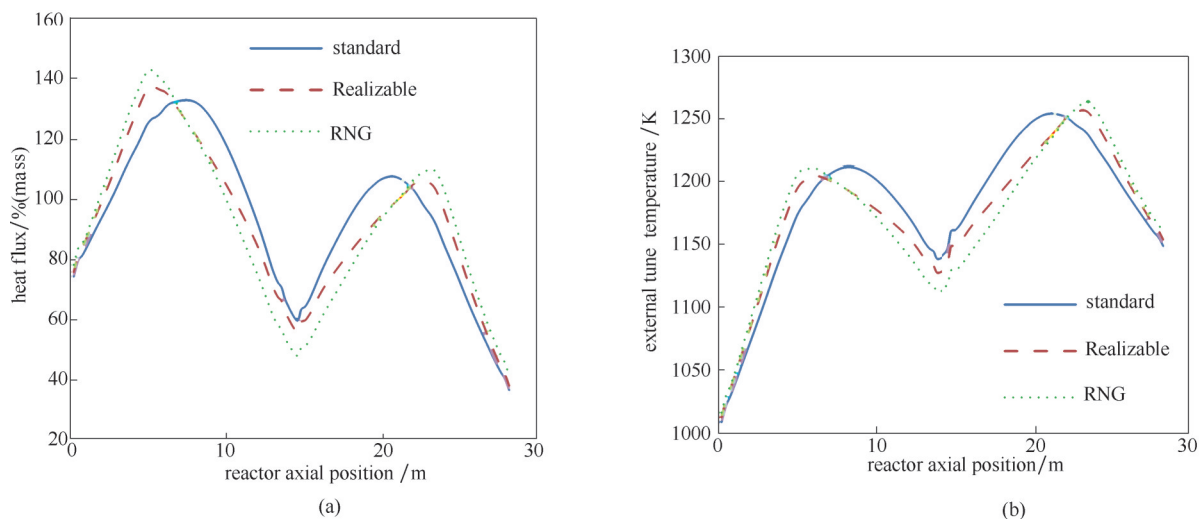


图10 不同湍流模型热通量、炉管外壁温度分布曲线

Fig.10 Heat flux of different turbulence models and temperature distribution curve of outer wall of furnace tube

布非常相似,都显示出两个最大值,即每一程有一个峰值,且峰值位于离炉底4~6 m的区域。使用标准 $k-\varepsilon$ 模型,与另两种湍流模型相比,第一程的热通量峰值出现位置较低,即更加靠近炉膛底部。从图中还可看出在两峰之间,标准 $k-\varepsilon$ 模型的热通量下降速度变慢且相对较高,而热通量通过反应管第二程峰值后,热通量再次低于 Realizable $k-\varepsilon$ 和 RNG $k-\varepsilon$ 模型。这显示了封闭腔体内不同的湍流模型对湍流对流换热的影响,早期学者对自然对流的研究工作中都是用壁面函数法与标准 $k-\varepsilon$ 模型结合进行计算,而其在用于湍流自然对流中存在物理机制上的缺陷,这是因为标准 $k-\varepsilon$ 模型过度预测近壁区的湍流黏性,致使其 Prandtl 数相对较大,如图 11 所示,模型自然对流预测不准确。而 Realizable $k-\varepsilon$ 模型增加了对湍流黏度的计算公式(10),在近壁区的湍流黏性预测更加准确,所以能更准确地预测实际裂解炉内湍流自然对流的情况,故应优先考虑。在以往学者研究工作中,在炉膛内的热传递中更加侧重考虑辐射传热对热通量的影响,并没有评估过湍流自然对流换热的影响^[30]。这一考虑显示了在本文中评估不同湍流模型对裂解炉与反应器耦合模拟的重要性。

图 10(b)显示了反应管外壁温度曲线,其趋势与热通量曲线基本相同。由于相似的热通量分布, Realizable $k-\varepsilon$ 和 RNG $k-\varepsilon$ 模型显示非常相似的结果。使用标准 $k-\varepsilon$ 模型时,在两程峰值之间由于较高的热通量所以模拟出较高的管外壁温度。

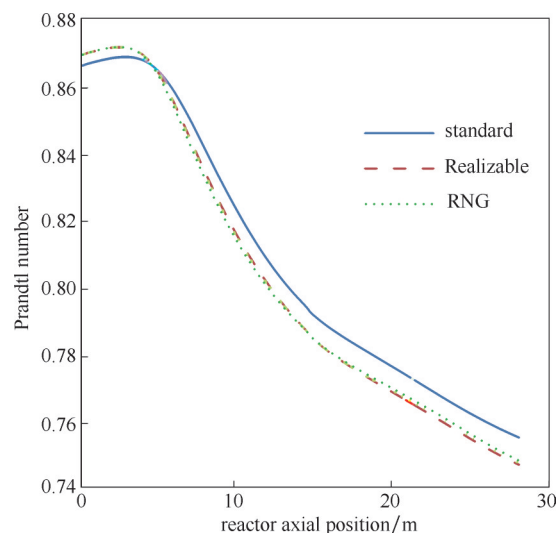


图11 不同湍流模型的 Prandtl 数比较

Fig.11 Comparison of Prandtl numbers for different turbulence models

3.3 模拟结果的工业数据验证

表 2 将使用不同湍流模型获得的最重要模拟结果与工业数据^[31]进行了比较。由于 Realizable $k-\varepsilon$ 模型采用更加精确的耗散率传输公式,与标准 $k-\varepsilon$ 和 RNG $k-\varepsilon$ 模型相比,该模型的油气出口温度(COT)更高且乙烯的比率更低,且更加接近实际工况下的数值。与工业数据相比,标准 $k-\varepsilon$ 模型和 RNG $k-\varepsilon$ 模型模拟线圈(炉管底部线圈)出口油气温度分别低 5~9 K,这导致模拟的裂化严重程度低,即较高的丙烯-乙烯比(P/E)。比较所有湍流模型的模拟结果与工业数据, Realizable $k-\varepsilon$ 表现最佳,是适应性最好的模型。

表 2 不同湍流模拟计算值与工业值的比较

Table 2 Comparison of simulated and industrial values between different turbulences

项目	工业值	标准 $k-\varepsilon$ 模型	Realizable $k-\varepsilon$ 模型	RNG $k-\varepsilon$ 模型
出口油气温度/K	1108	1102.8	1104.6	1099.6
最大管壁温度/K	1247.6	1251.9	1253.5	1260.4
过剩氧含量/(%)	2	1.81	1.90	1.90
炉管油气压降/MPa	0.0433	0.0350	0.0366	0.0355
P/E	0.68	0.72	0.68	0.0.74
乙烯收率/(%)	30.143	29.86	29.74	29.46

4 结 论

本文主要评估了标准 $k-\varepsilon$ 模型、RNG $k-\varepsilon$ 和 Realizable $k-\varepsilon$ 模型对于工业乙烯裂解炉的耦合模拟的影响。结果表明,在相同的边界条件下不同的湍流模型的模拟能力有较大的差别。与标准 $k-\varepsilon$ 模型相比,Realizable $k-\varepsilon$ 和 RNG $k-\varepsilon$ 模型的结果在炉膛烟气速度与炉膛温度分布有相似的结果,但 Realizable $k-\varepsilon$ 模型在火焰稳定性、反应效率、湍流能力等方面优于其他两种模型。而且,与标准 $k-\varepsilon$ 和 RNG $k-\varepsilon$ 模型相比,Realizable $k-\varepsilon$ 模型的污染物的排放量更低。将所有湍流模型的模拟结果与工厂设计数据进行比较,Realizable $k-\varepsilon$ 模型表现最佳,适应性最好。因此 Realizable $k-\varepsilon$ 模型是用于模拟该型乙烯裂解炉的推荐湍流模型。

符 号 说 明

G_k ——由平均速度梯度引起的湍流动能
 U_i ——速度矢量
 Y_i^* ——时间 τ^* 后细微尺度内组分 i 的质量分数
 μ_t ——湍流黏性系数
 ξ^* ——细微尺度长度分数
 ρ ——流体密度
 σ_ε ——湍流 Prandtl 数
 τ^* ——反应时间尺度

参考文献

- 陈滨. 乙烯工学[M]. 北京: 化学工业出版社, 1997: 63-67.
Chen B. Ethylene Engineering[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 1997: 63-67.
- 韩云龙, 章名耀, 程相杰. 乙烯裂解炉内燃烧、传热与裂解反应的模拟计算[J]. 石油学报(石油加工), 2006, 22(6): 63-68.
Han Y L, Zhang M Y, Cheng X J. Numerical simulation on combustion, heat transfer and naphtha pyrolysis reactions in ethylene cracking furnace[J]. Acta Petrolei Sinica (Petroleum Processing Section), 2006, 22(6): 63-68.
- 蔡树棠, 刘宇陆. 湍流理论[M]. 上海: 上海交通大学出版社, 1993.
Cai S T, Liu Y L. Turbulence Theory[M]. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press, 1993.
- 王焱. 封闭腔内湍流自然对流换热及工程应用[M]. 北京: 科学出版社, 2015.
Wang Y. Turbulent Natural Convection Heat Transfer in Enclosed Cavity and Its Engineering Application [M]. Beijing: Science Press, 2015.
- 李鹏飞, 徐敏义. 精通 CFD 仿真与案例实战[M]. 北京: 人民邮电出版社, 2017.
Li P F, Xu M Y. Proficient in CFD Simulation and Case Combat [M]. Beijing: Posts and Telecom Press, 2017.
- Gasser H, Mohamed P. Predictions of CO and NO_x emissions from steam cracking furnaces using GRI 2.11 detailed reaction mechanism — a CFD investigation[J]. Computers and Chemical Engineering, 2013, 58(45): 68-83.
- 王国清. 裂解炉数值模拟技术进展[J]. 石油化工, 2010, 39(5): 476-481.
Wang G Q. Progress in numerical simulation technology of cracking furnace[J]. Petrochemical Technology, 2010, 39(5): 476-481.
- Habibi A, Merci B, Heynderickx G J. Multiscale modeling of turbulent combustion and NO_x emission in steam crackers[J]. AIChE Journal, 2007, 53(9): 2384-2398.
- Shih T H, Liou W W. A new $k-\varepsilon$ eddy viscosity model for high Reynolds number turbulent flows: model development and validation[J]. Comput Fluids, 1995, 24 (3) : 227-238.
- Arman B, Rabas T J. Two-layer-model predictions of heat transfer inside enhanced tubes[J]. Number Heat Transfer, Part A, 1994, 25: 727-741.
- 肖志祥, 李凤蔚, 鄂琴. 三种湍流模型模拟能力的对比 [J]. 西北工业大学学报, 2002, 20(3) : 351-355.
Xiao Z X, Li F W, E Q. Comparison of three turbulence model simulation capabilities[J]. Journal of Northwestern Polytechnical University, 2002, 20(3): 351-355.
- 陈银. 涡耗散概念燃烧模型耦合简化机理的多维数值模拟[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2015.
Chen Y. Multi-dimensional numerical simulation based on eddy dissipation concept combustion model coupling reduced chemical reaction[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2015.
- 刘时涛. SL-II 型工业乙烯裂解炉内燃烧传热与裂解反应的耦合模拟[J]. 化工学报, 2011, 62(5): 1308-1318.
Liu S T. Coupled simulation of combustion with heat transfer and cracking reaction in SL-II industrial ethylene [J]. CIESC Journal, 2011, 62(5): 1308-1318.
- 王菁. 大型燃气乙烯裂解炉燃烧过程的模拟研究 [D]. 天津: 天津大学, 2016.
Wang J. The simulation of the combustion process for the large-

- scale ethylene cracking furnace [D]. Tianjin: Tianjin University, 2016.
- [15] 毕文涛, 郭英锋. 乙烯裂解炉管内裂解反应的CFD模拟[J]. 天津科技大学学报, 2008, **23**(1): 49–52.
- Bi W T, Guo Y F. CFD simulation of cracking reaction in ethylene cracking furnace[J]. Journal of Tianjin University of Science and Technology, 2008, **23**(1): 49–52.
- [16] Denison M K, Webb B W. A spectral line-based weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary RTE solvers[J]. Journal of Heat Transfer, 1993, **115**(4): 1002–1013.
- [17] 蓝兴英, 高金森, 徐春明. 乙烯裂解炉内传递和反应过程综合数值模拟研究(Ⅲ): 炉膛内燃烧和传热过程的数值模拟[J]. 石油学报(石油加工), 2004, **20**(1): 46–48.
- Lan X Y, Gao J S, Xu C M. Numerical simulation study on the transfer and reaction process in ethylene pyrolyzer(Ⅲ): Numerical simulation of combustion and heat transfer process in furnace[J]. Acta Petrolei Sinica (Petroleum Processing Section), 2004, **20**(1): 46–48.
- [18] 孙明波, 白雪松. 湍流燃烧火焰面模式理论及应用[M]. 北京: 科学出版社, 2014.
- Sun M B, Bai X S. Theory and Application of Turbulent Combustion Flame Surface Mode [M]. Beijing: Science Press, 2014.
- [19] Chen Q. Comparison of different $k-\varepsilon$ models for indoor air flow computations[J]. Numerical Heat Transfer, Part B, 1995, **28**: 353–369.
- [20] 蒲宁. 航空发动机燃烧室数值仿真中湍流模型比较研究[D]. 沈阳: 沈阳航空工业学院, 2009.
- Pu N. Comparison of turbulence models for aero-engine combustor numerical simulation[D]. Shenyang: Shenyang Aerospace University, 2009.
- [21] Stefanidis G D, Merci B. CFD simulations of steam cracking furnaces using detailed combustion mechanisms[J]. Computers and Chemical Engineering, 2006, **30**: 635–649.
- [22] Hu G H, Carl M S. Impact of radiation models in coupled simulations of steam cracking furnaces and reactors[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2015, **54**(9): 2453–2465.
- [23] 申海女, 何细藕. 计算流体力学在裂解炉设计上的应用[J]. 乙烯工业, 2004, **16**(4): 34–37.
- Shen H N, He X O. Application of computational fluid dynamics in design of cracking furnace[J]. Journal of Ethylene Industry, 2004, **16**(4): 34–37.
- [24] Zhang Y, Qian F. Impact of flue gas radiative properties and burner geometry in furnace simulations[J]. AIChE Journal, 2015, **61**(3): 936–954.
- [25] Wu H L, Peng X F, Ye P, et al. Simulation of refrigerant flow boiling in serpentine tubes[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2007, **50**(6): 1186–1195.
- [26] Takamasa T, Hazuku T, Hibiki T. Experimental study of gas-liquid two-phase flow affected by wall surface wettability[J]. International Journal of Heat and Fluid Flow, 2008, **29**(6): 1593–1602.
- [27] Yang Z, Peng X F, Ye P. Numerical and experimental investigation of two phase flow during boiling in a coiled tube [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2008, **51**(5): 1003–1016.
- [28] Dziak J, Kubala M. Heat and mass transfer during thin-film evaporation of two-component liquid solutions [C]//20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering. 2010: 613–626.
- [29] 王力军, 蔡久菊. 湍流燃烧混合对 NO_x 生成的影响[J]. 冶金能源, 2003, **22**(4): 22–24.
- Wang L J, Cai J J. Effect of mixture in turbulent combustion on NO_x formation[J]. Energy for Metallurgical Industry, 2003, **22**(4): 22–24.
- [30] Liu Z, Bi Q, Guo Y, et al. Heat transfer characteristics during subcooled flow boiling of a kerosene kind hydrocarbon fuel in a 1mm diameter channel[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2012, **55**(20): 4987–4995.
- [31] Hu G H, Wang H G. Coupled simulation of an industrial naphtha cracking furnace equipped with long-flame and radiation burners [J]. Computers and Chemical Engineering, 2012, **38**(38): 24–34.