

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГАЗИФИКАЦИИ УГЛЯ И ВЛИЯНИЯ РЕЖИМНЫХ ПАРАМЕТРОВ НА ЕГО ИНТЕНСИВНОСТЬ

Донской И.Г., Шаманский В.А.

Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, Иркутск

Введение

Математическое моделирование процесса газификации твердого топлива представляет собой важную задачу, поскольку может быть применено для определения характеристик процесса на этапе проектирования. Однако при формулировке физико-химической модели и при создании вычислительного алгоритма для проведения практических расчетов может возникнуть ряд трудностей. Это особенно актуально для диффузионно-кинетических моделей. Последовательный учет происходящих в газогенераторе химических, тепло- и массообменных процессов приводит к системе дифференциальных уравнений, описывающих баланс массы и энергии в аппарате. Такие модели дают возможность достаточно полно исследовать процесс во времени и пространстве и получить таким образом необходимые при проектировании оборудования сведения. Недостатком кинетических моделей является то, что они нуждаются в информации о детальном механизме процессов, который мало изучен для гетерогенных и твердофазных процессов, какими являются пиролиз и реакции твердого топлива с газами. Кроме того, константы скорости отдельных стадий такого механизма часто имеют высокую вариабельность. Возможно использование более простых моделей, например – равновесных. Термодинамический подход позволяет обойтись без сведений о механизме протекающих реакций и процессов тепломассообмена в аппарате при расчете состава газа и топлива. При этом в условиях ненадежных данных о механизмах реакций и константах скоростей отдельных стадий равновесные оценки должны стать более надежными и универсальными. Однако при равновесном моделировании теряется возможность определения таких важных параметров, как скорость химического превращения топлива и интенсивность связанных с ним тепловых потоков. Кроме того, неизбежна переоценка степени завершенности химических реакций, которая может дать значительное отклонение рассчитанных значений от экспериментальных данных.

Метод моделей экстремальных промежуточных состояний (МЭПС) позволяет до определенной степени сочетать преимущества кинетического и термодинамического подходов [1]. Это становится возможным, если считать промежуточные состояния физико-химической системы равновесиями, ограниченными кинетикой процессов химического превращения и процессов переноса. Такой подход может быть применен к моделированию процессов, механизм которых до конца не известен, как в случае термохимической конверсии твердых топлив.

На основе МЭПС была построена модель процесса обращенной газификации угля, описывающая стационарное состояние одномерного реактора. При этом использовалась разностная схема для расчета теплообмена, учет макроки-

нетики заключался в явном использовании выражений для скорости реакций термического разложения и газификации топлива. В каждой точке реактора состав соответствовал равновесию, ограниченному процессами теплообмена и химических превращений топлива.

Однако при расчетах равновесий в распределенных системах могут также возникать некоторые трудности, связанные с численной реализацией модели. В работе обсуждаются некоторые из этих трудностей и предложены способы их решения.

Формулировка модели

В настоящей работе обсуждается одномерная модель обращенного угольного газогенератора. Представляя одномерный газификатор в виде последовательности элементарных объемов, обменивающихся теплотой и массой, можно принять, что в каждом таком объеме температуры газа, топлива и стенки постоянны. Поэтому за время прохождения газом каждого элементарного объема реакции идут при постоянных температуре и давлении. Такое предположение значительно упрощает решение уравнений для количества топлива, перешедшего в газовую фазу. Для описания химических процессов в газификаторе используется МЭПС. Задача на поиск равновесия в газовой фазе записывается следующим образом:

Найти $\min G(x)$ при условиях:

$$G(x) = \sum_j^{n_{gas}} \mu_j x_j \quad (1)$$

$$Ax = b \quad (2)$$

$$x_j \geq 0 \quad \forall j \quad (3)$$

где $G(x)$ - свободная энергия Гиббса газовой фазы Дж; x, x_j - вектор состава и количество j -го компонента, моль; μ_j - химический потенциал j -го компонента, Дж/моль; A - молекулярная матрица; b - вектор количеств элементов в системе, моль.

Скорость пиролиза и реакций топлива с газами учитываются путем введения в модель макрокинетических уравнений. В качестве топлива был взят азейский уголь.

Масса топлива, перешедшего в газовую фазу за время прохождения газа через элементарный объем, предполагается складывающейся из массы, ушедшей с пиролизом и газификацией:

$$\Delta m_i^f = \Delta m_i^{pyr} + \Delta m_i^{gasif} \quad (4)$$

Выражения для отдельных слагаемых находятся в предположении о первом порядке реакций (пиролиза – по топливу, газификации – по окислителю):

$$\Delta m^{pyr} = m^f (1 - \exp(-k_{pyr} \tau)) \quad (5)$$

$$\Delta m^{gasif} = M_r \sum_j^{J_{ox}} x_j^0 \left(1 - \exp\left(-\frac{Sk_j}{V} \tau\right) \right) \quad (6)$$

где m^f - масса топлива в элементарном объеме, кг; k_{pyr} - константа скорости пиролиза, 1/с; τ - время реакции, с; M_r - молярная масса топлива, кг/моль; x_j^0 - количество j -го окислителя в газовой фазе, моль; S - площадь поверхности топлива, кг; k_j - эффективная константа скорости j -ой реакции газификации, м/с, найденная из выражения:

$$k_i = \frac{1}{\frac{\exp(E_i/RT)}{A_i} + \frac{d_f}{Nu_D D_i}} \quad (7)$$

где A_i - предэкспонент гетерогенной реакции, м/с; E_i - энергия активации гетерогенной реакции, Дж/моль; d_f - размер частицы топлива, м; D - коэффициент диффузии окислителя в газовой фазе, м²/с; Nu_D - диффузионное число Нуссельта, рассчитанное по эмпирической формуле:

$$Nu_D = 2 + 0.16Re^{0.66} \quad (8)$$

где Re - число Рейнольдса.

Степень конверсии топлива находится по формуле:

$$\xi_k^f = \frac{\sum_j^k \frac{\Delta m_j^f}{\tau_j}}{0.01 Q_f (1 - A - W)} \quad (9)$$

где ξ_k^f - степень конверсии топлива в k -ом элементарном объеме; Q_f - расход топлива на входе в реактор, кг/с; A - зольность топлива, %; W - влажность топлива, %.

Учет макрокинетики при расчете термодинамического равновесия (1-3) происходит следующим образом. Зная потоки и степень конверсии топлива на входе и на выходе из каждого элементарного объема, можно найти потоки элементов. Для этого надо знать состав топлива, соответствующий разным степеням конверсии. Кинетика гетерогенных реакций и состав топлива (азейский уголь) на разных степенях конверсии были найдены из результатов термического анализа [2]. Разница входящего и выходящего потоков элементов с топливом, очевидно, соответствует потоку в газовую фазу. Тогда можно найти количество элементов, переходящее в газовую фазу за время прохождения газа по ячейке τ . Если изначально состав газовой фазы в ячейке характеризовался вектором b_0 (см. уравнение (2)), то после реакции количество каждого элемента увеличивается:

$$b = b_0 + \Delta j \tau \quad (10)$$

где b_0 - вектор количеств элементов до реакции, моль; b - вектор количеств элементов после реакции, моль; Δj - разность между входящим и выходящим потоками элементов, моль/с. Естественным ограничением является $\Delta j_i \geq 0$ для всех i .

Тепловые потоки, связанные с химическими реакциями, рассчитываются как разность входящих и выходящих потоков энтальпий газа и топлива.

Таким образом, модель описывает динамический процесс в реакторе как последовательность дискретных состояний, которая может быть интерпретирована как траектория процесса.

Оптимизация параметров алгоритма для расчета температурных профилей

Температурные профили находятся в результате решения уравнений теплового баланса реактора. Расход дутья является переменной величиной. Начальный расход топлива принимался за стехиометрически необходимый для полной газификации топлива при заданном расходе дутья. Поиск решения итеративен. В качестве первого приближения принимается произвольный профиль температур. На каждой итерации при заданном температурном профиле рассчитывается кинетика гетерофазных реакций и равновесие в газовой фазе, для каждого элементарного объема рассчитывается мощность внутренних источников теплоты, после чего решается задача стационарного теплообмена во всем газификаторе. При этом на каждой итерации считается, что тепловые потоки постоянны, а состав газа и топлива не зависит от температуры. Критерием сходимости алгоритма в данном случае является максимальная абсолютная разность температур между двумя последовательными итерациями, $\max |T_{i+1} - T_i|$. При уменьшении этой величины до некоторого заданного ε_T профиль температур считается стационарным.

В такой постановке сходимость метода оказалась медленной, поскольку небольшие изменения в температурном поле могут приводить к существенным изменениям скоростей химических реакций и, как следствие, существенно меняют температурный профиль на следующей итерации. В результате между итерациями могут возникать колебания критерия сходимости, вызванные переходом температурного профиля от одной неустойчивой формы к другой.

Устранить такие колебания можно, если использовать данные о предыстории вычислительного процесса (процесс памятью). При этом в качестве следующего приближения к стационарному решению принимается не само найденное методом Ньютона, а его линейная комбинация с предыдущим приближением:

$$T'_{i+1} = \alpha T_{i+1} + (1 - \alpha) T_i \quad (11)$$

Эмпирически было обнаружено, что значение α , для которого наблюдается удовлетворительная сходимость для разных вариантов расчета, равно 0,618. Нет необходимости применять процесс памятью постоянно. Условием использования линейной комбинации (11) является неравенство:

$$\max |T_i - T_{i-1}| > \max |T_{i-1} - T_{i-2}| \quad (12)$$

Смысл неравенства состоит в том, что для сходимости решения достаточно, чтобы значение критерия сходимости не возрастало с итерациями. Если же наблюдается такой рост, то необходимо использовать уравнение (11).

Оптимизация расхода топлива

Новизной модели является ее способность оптимизировать расход топлива под заданное значение степени конверсии. Для этого в процессе расчета расход топлива Q_{i+1}^f выбирается в соответствии с изменением степени конверсии на выходе ξ_i . Выбор вида функции $Q_{i+1}^f(\xi_i)$ не тривиален. Опытным путем был получен следующий вид функции:

$$Q_{i+1}^f = Q_i^f \varphi^d \quad (13)$$

$$d = \begin{cases} 1; & \xi_i / \xi_{fix} \geq 1 \\ -1; & \xi_i / \xi_{fix} < 1 \end{cases} \quad (14)$$

$$\varphi = \begin{cases} 1 + 0.01 \frac{\max |T_i - T_{i-1}|}{\varepsilon_T}; & \frac{\max |T_i - T_{i-1}|}{\varepsilon_T} \leq 5 \\ 1.05; & \frac{\max |T_i - T_{i-1}|}{\varepsilon_T} > 5 \end{cases} \quad (15)$$

где Q_i^f - расход топлива для i -ой итерации, кг/с; ξ_i - степень конверсии топлива на i -ой итерации. Критерием останова служит условие одновременного выполнения условия стационарности температуры и достижения оптимального расхода:

$$0 < \xi_i - \xi_{fix} < \varepsilon_f \quad (16)$$

Для критерия останова взята разность степеней текущей и заданной конверсии, а не ее абсолютное значение, что гарантирует отсутствие недожога.

Благодаря описанным условиям удалось получить достаточно эффективный алгоритм, который находит решение за 20-30 итераций.

Множественность решений

Особенностью алгоритма является множественность стационарных решений. Для «розжига» реактора в модели используется П-образный начальный профиль температур. В зависимости от места расположения начального П-импульса в реакторе устанавливаются близкие по форме распределения температур, сдвинутые по высоте слоя относительно друг друга (рис. 1).

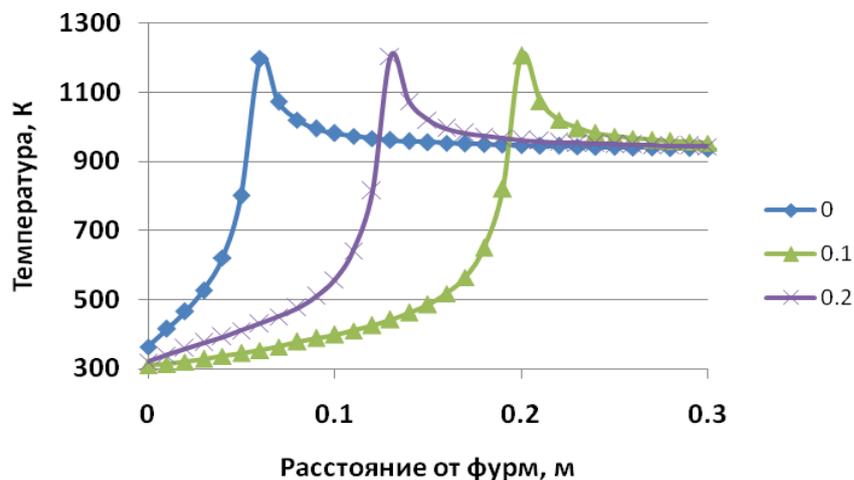


Рис. 1. Стационарное распределение температур при разных местах «розжига».

На рис. 1 показаны распределения температуры газа при разных расположениях начального температурного импульса (в долях от длины реактора - показаны справа от графиков).

Как и следует ожидать, ядро горения образуется тем дальше от фурм, чем дальше расположен максимум температур начального распределения. Расход топлива при этом уменьшается, температура ядра горения незначительно падает. Такое поведение можно объяснить тем, что при заданной степени конверсии топлива на выходе из реактора, с приближением ядра горения к выходу из реактора для зоны восстановительного горения остается все меньше места. Соответственно, меньшее количество теплоты реакции тратится на эндотермические реакции.

На настоящий момент сложно сказать, осуществимы ли все эти решения в реальности. Для того, чтобы ответить на этот вопрос, необходимо экспериментальное исследование газификатора с разными способами зажигания топлива (например, при зажигании через стенку интенсивным излучением).

Влияние режимных параметров на интенсивность процесса

Модель была использована для численного исследования влияния параметров дутья на интенсивность обращенного процесса газификации азейского угля. Для этого варьировали температуру и расход дутья.

Для расчетов были приняты следующие значения параметров: длина реактора – 0.5 м, диаметр реактора – 0.2 м; топливо – азейский уголь (влажность 5%, зольность 20%), фракция 4-6 мм; дутье – воздух.

Влияние начальной температуры дутья было исследовано в диапазоне 300-1300 К. На рис. 2 показаны графики зависимости режимных показателей от температуры воздуха на входе.

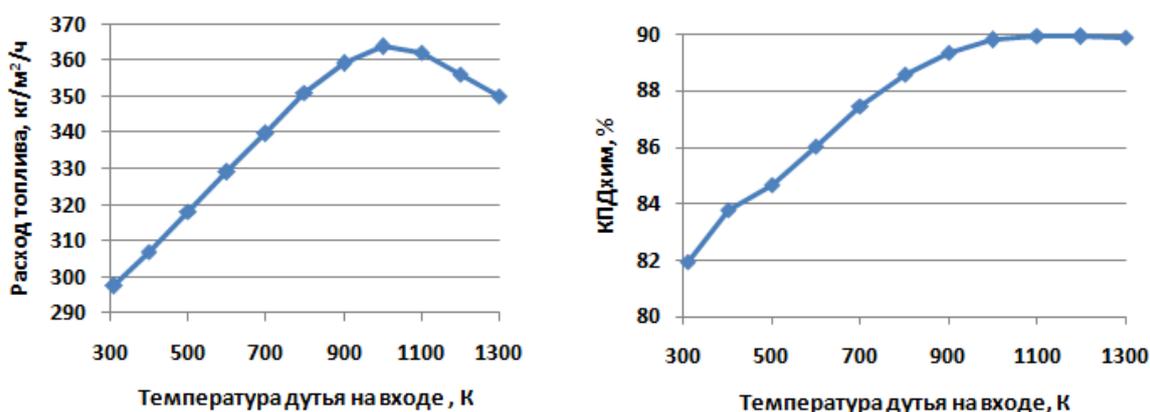


Рис. 2. Зависимость режимных показателей от температуры дутья на входе.

Из рис. 2 видно, что расход топлива имеет оптимум при предварительном нагреве дутья. Оптимум соответствует примерно 1000 К. Причина такого поведения может быть в том, что при более высоких температурах увеличиваются теплотери. Рост химического КПД (отношение теплоты сгорания генераторного газа к теплоте сгорания исходного топлива) имеет вид кривой насыщения и не превышает 90%.

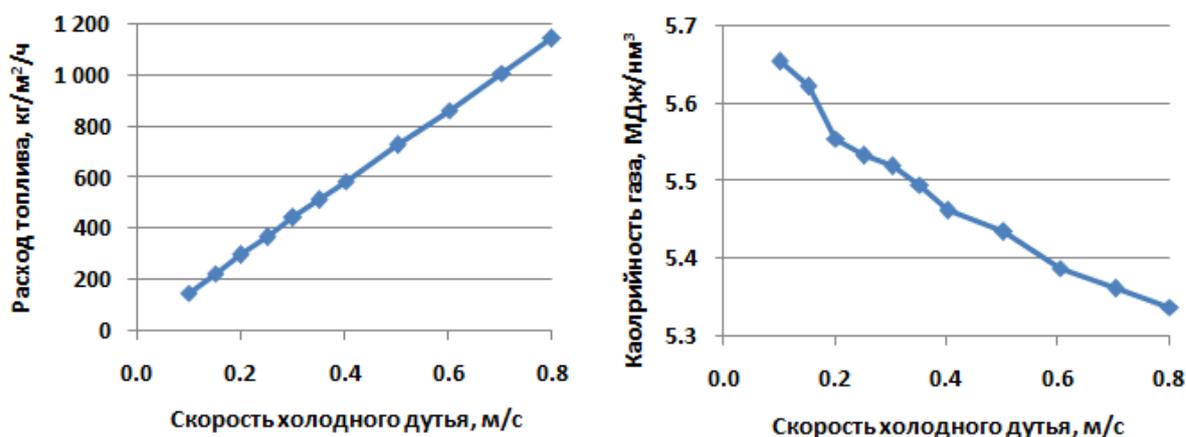


Рис. 3. Зависимость режимных показателей от расхода воздуха.

Как видно из рис. 3, расход топлива прямо пропорционален расходу дутья. Калорийность газа с ростом расхода падает, что может быть вызвано «термодинамическим» эффектом, связанным с образованием метана – с ростом расходов падают удельные теплотери, температура в реакторе растет. С ростом температуры равновесие в реакциях образования метана смещается в сторону реагентов, что приводит к уменьшению количества метана на выходе и уменьшению калорийности газа.

Заключение

В работе показано, что при моделировании процессов газификации топлив в условиях неопределенности кинетической информации целесообразно использовать МЭПС. Предложена модель, в которой состав газовой фазы в каждый момент считается равновесным по отношению к составу топлива. Скорость срабатывания и состав топлива найдены из данных термического анализа.

Предложены способы повышения эффективности алгоритма. С помощью полученной модели проведено численное исследование влияния управляющих параметров (температура и расход дутья) на интенсивность срабатывания топлива.

Литература

1. Технология термодинамического моделирования. Редукция моделей движения к моделям покоя / Б.М. Каганович, А.В. Кейко, В.А. Шаманский, И.А. Ширкалин, М.С. Зароднюк. - Новосибирск: Наука, 2010. - 236 с.
2. Thermal analysis in numerical thermodynamic modeling of solid fuel conversion / A. Kozlov, D. Svishev, I. Donskoy, A.V. Keiko // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. - 2012. - V. 109. - No. 3. - P. 1311-1317.