УДК 662.7: 621.4: 536.4

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗИФИКАЦИИ УГЛЯ В ПЛОТНОМ СЛОЕ

Маришин Н.С.[1], Таймасов Д.Р.[1], Пермяков Е.Е.[1], Сеначин ПК.[1, 2]

[1] Алтайский государственный технический университет (АлтГТУ), г. Барнаул
[2] Институт теплофизики СО РАН, г. Новосибирск

Введение

В настоящее время наблюдается рост интереса к использованию местных топливных ресурсов (включая отходы углеобогащения, бурые угли, древесные отходы, торф, промышленные и бытовые отходы) для энергообеспечения удаленных потребителей и малоэтажных жилых домов [1, 2]. Одним из источников энергообеспечения этих объектов является газификации брикетированного твердого топлива в плотном слое в газогенераторах различных типов (традиционно это газогенераторы, работающие по схеме прямого процесса Lurgi, но уже появляются технологические схемы газогенераторов обращенного процесса). Процесс сдерживается отсутствием современной нормативной методики для инженерных расчётов физико-химических процессов в таких устройствах. Существует несколько стационарных одномерных математических моделей реакторов газификации твердого топлива в плотном слое, в том числе представленных в работах [1, 3-10].

С целью апробации этих и других математических моделей слоевого горения угля, нами был проведён их анализ, на основе которого в базовую модель были внесены некоторые изменения. После этого математическая модель была реализована численными методами, описанными ниже, в среде «SciLab».

Математическая модель слоевого реактора

В модели рассматривается одномерный адиабатический противоточный газогенератор Lurgi, уголь представлен в виде пористой среды, составленной из монодисперсных сферических частиц диаметра d_0 с жёстким зольном скелетом и выгорающим углеродным ядром, порозность (отношение объёма пор к общему объёму) принимается одинаковой по всей высоте газогенератора. Через пористую среду фильтруется газовая фаза. Температура угля и газа на каждой высоте газогенератора одинакова. Обычно в реакторах Lurgi выделяют несколько зон, в том числе: сушки, выхода летучих, восстановительную, окислительную, зольную подушку (рис. 1), однако в настоящей работе рассматриваются только окислительная и восстановительная зоны.

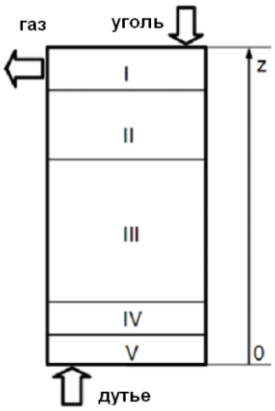

Рисунок 1.
Принципиальная схема газогенератора Lurgi и его реакционных зон:
I – зона сушки,
II – зона выхода летучих,
III – восстановительная зона,
IV – окислительная зона,
V – зольная подушка

На вход газогенератора (при $z = 0$) подаётся смесь воздуха в пара, и на поверхности пор протекают следующие гетерогенные реакции:

1) $C + O_2 = CO_2 + 395$ кДж/моль
2) $2C + O_2 = 2CO + 219$ кДж/моль
3) $C + CO_2 = 2CO$ -175.5 кДж/моль.
4) $C + H_2O = CO + H_2$ -130.5 кДж/моль

Считается, что при наличии кислорода происходит гомогенное сгорание CO и H_2 до CO_2 и H_2O по реакциям

5) $2CO + O_2 = 2CO_2 + 570.5$ кДж/моль.
6) $2H_2 + O_2 = 2H_2O + 480$ кДж/моль,

при этом тепловой эффект этих реакций относится к газовой фазе.

Основные уравнения, описывающие процесс газификации, следующие:

- уравнения неразрывности для каждого *j*-го компонента газовой фазы

$$\rho_j \frac{dw_ф}{dz} + w_ф \frac{d\rho_j}{dz} = M_j \sum_i \xi_{ij} W_i^{gom}, \tag{1}$$

где ρ_j - действительная плотность *j*-го компонента газовой фазы, w_f - скорость фильтрации относительно угля, M_j - молярная масса *j*-го компонента, W_i^{gom} - скорость *i*-й гомогенной реакции, ξ_{ij} - стехиометрический коэффициент *i-й* гомогенной реакции (где продукты реакции имеют знак «+»);

- уравнение неразрывности для твёрдой фазы

$$\rho_C^0 u_C \frac{d\eta}{dz} = M_C \sum_i \xi_{iC} W_i^{get}, \tag{2}$$

где η - глубина выгорания угля, лежащая в пределах от 0 до 1 (1 соответствует полному выгоранию), ρ_c^0 - начальная плотность углерода, u_C - скорость угля относительно стенок, M_C - молярная масса углерода, W_i^{get} - скорость *i*-й реакции с участием угля, ξ_{iC} - стехиометрический коэффициент *i*-й гетерогенной реакции (где продукты реакции имеют знак «+»);

- уравнения теплового баланса

$$w_ф - u_C \sum_s c_s \rho_s \frac{dT_g}{dz} = \varepsilon \lambda_g \frac{d^2 T_g}{dz^2} + k_{gom} \sum_i W_i^{get} Q_i^{get} + \sum_i W_i^{gom} Q_i^{gom} - \frac{\alpha_{gC}}{r_{gen}} \left(T_g - T_C\right) - \frac{\alpha_{g0}}{r_{gen}} \left(T_g - T_0\right), \tag{3}$$

$$-u_C \left[c_C \rho_C^0 \left(1-\eta\right) + c_b \rho_b\right] \frac{dT_C}{dz} = \left(1-\varepsilon\right) \lambda_C \frac{d^2 T_C}{dz^2} + \left(1-k_{gom}\right) \sum_i W_i^{get} Q_i^{gtt} + \frac{\alpha_{gC}}{r_{gen}} \left(T_g - T_C\right) - \frac{\alpha_{C0}}{r_{gen}} \left(T_C - T_0\right), \tag{4}$$

где ε - порозность. c_s - теплоемкость компоненты *s* газовой фазы, c_C - теплоёмкость углерода, c_b - теплоемкость балласта, ρ_b - плотность балласта, λ_C - коэффициент теплопроводности твердой фазы. Q_i^{gom}, Q_i^{get} - теплота *i-й* гомогенной и гетерогенной реакций, T_g - температура газа, λ_g - коэффициент теплопроводности газа (в силу преимущественно конвективного теплопереноса. можно положить λ_g=0), k_{gom} - параметр, показывающий какая часть энергии. выделяющейся при гетерогенных реакциях, поглощается

газом, T_C - температура твёрдой фазы, α_{gC} - коэффициент теплоотдачи между твёрдой фазой и газом, r_{gen} - внутренний радиус генератора;

- уравнение закона Дарси (для пористых сред)

$$\frac{dp}{dz} = -\frac{w_ф}{k_ф}, \tag{5}$$

где p - давление, $k_ф$ - коэффициент фильтрации, который можно вычислить, используя соотношение Козени-Кармана [8] (следует отметить, что закон применим для чисел Рейнольдса меньше или порядка единицы);

- уравнение состояния газовой фазы

$$p = \sum_s p_s = RT_g \sum_s \frac{\rho_s}{M_s}; \tag{6}$$

- уравнения скорости *i-й* газофазной (гомогенной) реакции (определяется законом Аррениуса)

$$W_i = k_i \prod_j A_{ij} \exp\left(-\frac{E_i}{RT_g}\right), \tag{7}$$

- скорость гетерогенной *i*-й реакции углерода с *j*-м компонентом газовой фазы

$$W_i = K_{Ci} S_C \ 1-\eta \ , \tag{8}$$

где $S_c = \dfrac{6(1-\eta)/d_0}{1+\ \rho_C^0/\rho_b \ \big/\ 100/A^r - 1}$, $K_{ci} = \dfrac{\beta_i A_j}{1/k_{Wi} + d_0/\ \mathrm{Nu_D} D_j}$,

A^r - зольность угля, A_j — концентрация *j*-го компонента газовой фазы, $\mathrm{Nu_D}$ - диффузионное число Нуссельта, D_j - коэффициент диффузии *j*-го компонента, k_{Wi} - кинетическая скорость *i*-й реакции, вычисляемая исходя из закона Аррениуса и предположения о существовании полюса скоростей [9]

$$k_{Wi} = k_i \exp\left(-\frac{E_i}{RT_{эфф}}\right). \tag{9}$$

Для расчёта скоростей гетерогенных реакций с разделением температур сред необходимо использовать некую эффективную температуру

$$T_{эфф} = k_{Tg} T_g + k_{TC} T_C,$$

где k_{Tg} и k_{TC} - коэффициенты, определяющие вклад температуры газа и твёрдой фазы соответственно.

Система (1)-(9) дополняется двумя замыкающими уравнениями:

- уравнение альтернативного условия прекращения горения

$$p \ 1-\eta \ = 0, \tag{10}$$

- кинематическое условие стационарности процесса (скорости горения u_f на фронте пламени)

$$u_f = w_ф - u_C = 0. \tag{11}$$

Граничные условия задачи учитывают, что рассматривается прямоточный реактор с охлаждаемым входом и секцией с отводящим генерируемый газ устройством, которые нарушают сплошность движения твердофазных компонентов, то есть имеем:
(на входе в реактор при z=0)

$$p = p_0, \quad T_g = T_{g0} = T_0, \quad T_C = C_{C0} = T_0, \quad \rho_g w_f = m_g^0, \quad A_j = A_j^0,$$

$$\frac{dT_g}{dz} = 0, \quad \frac{dT_C}{dz} = 0, \tag{12}$$

(на выходе из реактора при $z=h$)

$$p < p_0, \quad \eta = 0, \quad \rho_C = \rho_C^0, \quad \frac{dT_g}{dz} = 0, \quad \frac{dT_C}{dz} = 0. \tag{13}$$

Кроме того, на фронте пламени имеем

$$z = z_f, \quad \frac{dT_g}{dz} = 0, \quad \frac{dT_C}{dz} = 0, \quad A_{O2} = 0. \tag{14}$$

Численное решение задачи

Система уравнений (1)-(14) решается итерационным методом (рис. 2).

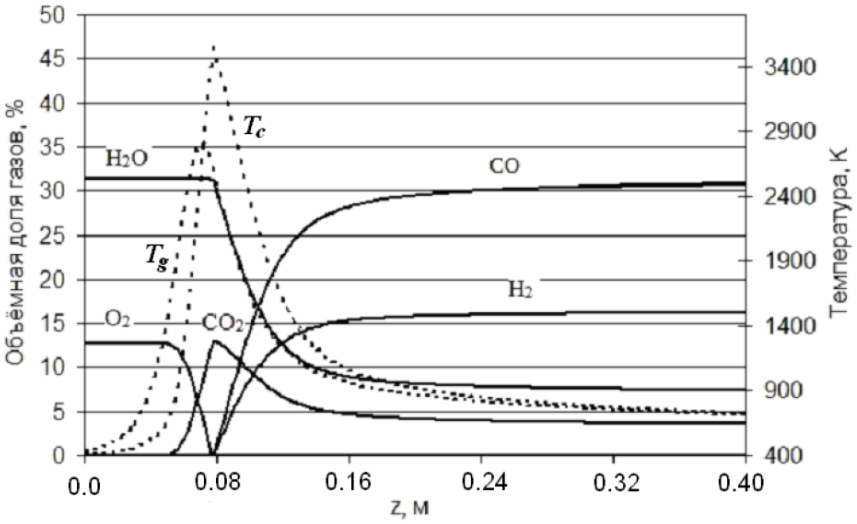

Рисунок 2. Профили объёмных долей газов и температур (обозначены пунктиром) для газовой и твёрдой фаз

Решение задачи можно разделить на ряд шагов:

1. Задаётся начальное приближение.
2. Проводится расчёт скоростей гетерогенных реакций.
3. Методом Рунге-Кутты рассчитываются распределения скорости фильтрации, плотностей газов, температуры газа, учитывая температуру и глубину выгорания из предыдущего приближения, и ранее полученные данные о скорости химических реакций.
4. Аналогично находятся профили температуры твёрдой фазы и глубины выгорания.
5. Если прошло определённое число шагов, обновляется информация о скорости гетерогенных или гомогенных реакций и переход на шаг 3, или же переход на него осуществляется сразу, также возможно прекращение решения, при достижении заданного значения невязок.

Из рис. 2 видно, что результаты расчёта качественно правильно отображают процессы в газогенераторе плотного сдоя. Достаточно высокие температуры объясняются, прежде всего, адиабатичностью процесса в реакторе (отсутствием теплоотдачи в

стенку при численном счете) и отсутствием в модели термической диссоциации и обратных химических реакций.

Литература

1. Загрутдинов Р.Ш. Технологии газификации в плотном слое: Монография / Р.Ш. Загрутдинов, А.Н. Нагорнов, А.Ф. Рыжков, П.К. Сеначин и др.; под ред. ПК. Сеначина. - Барнаул: ОАО «Алтайский дом печати», 2009. - 296 с.
2. Загрутдинов Равиль. Газификация в плотном слое: Цикл статей / монография / Равиль Загрутдинов, Павел Сеначин, Михаил Никишанин. – Saarbrucken, Deutschlend / Германия: Изд-во «LAP LAMBERT Academic Publishing», 2016. – 168 с.
3. Нагорнов А.Н. Физико-химические основы горения и газификации углей в плотном слое газификатора Lurgi / А.Н. Нагорнов, Р.Ш. Загрутдинов, П.К. Сеначин, С.М. Кисляк, Р.М. Утемесов // Энергетические, экологические и технологические проблемы экономики (ЭЭТПЭ-2008): Материалы второй Всероссийской научно-практической конференции с международным участием / Барнаул, АлтГТУ им. ИИ. Ползунова, 1-4 октября 2008. - Барнаул: ОАО «Алтайский дом печати», 2008. - С. 380-397.
4. Зайцев А.В. Газогенераторные технологии в энергетике: Монография / А.В. Зайцев, А.Ф. Рыжков, В.Е. Силин, Р.Ш. Загрутдинов, А.В. Попов, Т.Ф. Богатова и др. Под ред. А.Ф. Рыжкова. – Екатеринбург: ООО Изд-во «Сократ», 2010. – 612 с.
5. Степанов С.Г. Математическая модель газификации угля в слоевом реакторе / С.Г. Степанов, С.Р. Исламов // Химия твёрдого топлива. - 1991. - № *2*. - С. 52-58.
6. Кузоватов И.А. Численное моделирование физико-химических процессов в слоевом газификаторе / И.А. Кузоватов, А.А. Гроо, С.Г. Степанов // Вычислительные технологии. - 2005. - Т.10. №5. - С. 39-48.
7. Ворончихина Т.С. Компьютерная модель нестационарных процессов при слоевой газификации угля / Т.С. Ворончихина, В.С. Славин, С.Р. Исламов.// Сибирский физико-технический журнал. - 1993. - Вып. 3. - С. 85-90.
8. Аэров М.Э. Аппараты со стационарным зернистым слоем / М.Э. Аэров, О.М. Тодес, Д.А. Наринский. - Л.: Химия, 1979. - 176 с.
9. Леонтьев Н.Е. Основы теории фильтрации: Учебное пособие / Н.Е. Леонтьев. - М.: Изд-во Центра прикладных исследований при механико-математическом факультете МГУ, 2009. - 88 с.
10. Померанцев В.В. Основы практической теории горения: Учебное пособие для вузов / В.В. Померанцев, К.М. Арефьев, Д.Б. Ахмедов и др. - Л.: Энергоатомиздат. Ленингр. отделение, 1986. - 312 с.