

УДК 662.7

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
СТУПЕНЧАТОЙ ГАЗИФИКАЦИИ УГЛЯ В ПЛОТНОМ СЛОЕ****И.Г. Донской**Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН,
664033, Иркутск, ул. Лермонтова, 130, donskey.chem@mail.ru**Аннотация**

Работа посвящена разработке математической модели процесса ступенчатой газификации угля в плотном слое. Ступенчатая газификация предполагает разделение процесса переработки топлива на несколько стадий. В настоящей работе рассматривается процесс, в котором топливо последовательно подвергается пиролизу (полукоксованию) и газификации. При газификации в качестве дутья используются продукты сгорания пирогаза. Теплота, необходимая для пиролиза угля, получается при сжигании части произведенного синтез-газа. Такая организация процесса позволяет получать бессмольный газ (за счет сжигания смолистых веществ после стадии пиролиза) и избавиться от дорогостоящих систем очистки. В связи с этим появляется задача расчета и оптимизации режимов работы газогенераторов ступенчатого процесса. Поскольку в схеме процесса есть рециркулирующий поток, решение находится путем многократного расчета схемы, при котором уточняются стационарные значения режимных параметров. Расчет реакторов пиролиза исходного угля и газификации полукокса производится на основе разработанной автором модели слоевой термохимической конверсии твердых топлив. При расчете реакторов горения горючих газов применяется термодинамическая модель конечного равновесия при постоянных давлении и энтальпии. Построенная модель применяется для исследования влияния управляющих параметров – коэффициента рециркуляции синтез-газа и коэффициента избытка окислителя в камере сгорания пирогаза. Расчеты показывают, что существуют диапазоны изменения этих параметров, в пределах которых эффективность процесса (химический КПД) является достаточно пологой их функцией. Уменьшение коэффициента рециркуляции ниже оптимального значения (около 6-7 %) приводит к нехватке теплоты для осуществления пиролиза и, как следствие, к резкому снижению эффективности процесса. При увеличении доли сжигаемого синтез-газа выше 15 % увеличивается общий избыток окислителя в системе, что также уменьшает КПД газификации. Изменение избытка окислителя при сжигании пирогаза в широких пределах (1-1,8) практически не влияет на эффективность процесса, что связано с полезным использованием избыточного кислорода в реакторе газификации.

Ключевые слова: математическая модель, процесс, реактор, газификация

Введение

Технологии газификации угля и биомассы с получением горючего газа открывают перспективы создания автономных энергоустановок на местных топливах для малой энергетики, поэтому их всестороннее исследование является актуальной научно-технической проблемой. В диапазоне мощностей малой энергетики оказываются установки плотного и кипящего слоя. Газификация позволяет получать силовой и отопительный газ, при этом экологические показатели установок существенно улучшаются по сравнению с прямым сжиганием. Однако на настоящий момент технологии газификации не могут конкурировать с традиционными технологиями сжигания, поскольку имеют недостаточно высокую эффективность и низкую степень автоматизации управления.

Вопросы повышения эффективности и управляемости процесса газификации рассматривались в ряде работ. В работах [1, 2] был проведен теоретический анализ и экспериментальные исследования процесса газификации твердых топлив. Оказалось, что для процессов слоевой газификации существуют накладываемые макрокинетикой ограничения, не позволяющие достигать термодинамического предела. Природа этих ограничений связана в том числе с макрокинетическими особенностями превращений летучих и смолистых веществ.

В работах [3, 4] рассматриваются пути обхода ограничений, связанных с пиролизным разложением топлив, путем разнесения процессов пиролиза (полукоксования) и газификации в разные аппараты/части аппарата. При этом газ, полученный в результате пиролиза, полностью сжигается, а продукты его

сгорания являются дутьем в аппарате газификации. Раздельное проведение стадий пиролиза исходного топлива и газификации полукокса позволяет не только сделать процесс более управляемым, но и существенно улучшить качество горючего газа, т.к. при сжигании пирогаза существенно уменьшается загрязненность его смолой. Этот факт позволяет также избавиться от дорогостоящих систем очистки, подавая горючий газ напрямую в камеру сгорания двигателя.

Подобная технология для плотного слоя при различных вариантах организации потоков реализована на опытно-промышленных установках в ряде научно-исследовательских организаций [5, 6]. Наиболее подробно освещена в литературе установка Viking (Danmarks Tekniske Universitet) мощностью ок. 80 кВт(т) [7], в которой сушка и пиролиз топлива происходят в шнековом питателе, пирогаз сгорает в надслоевом пространстве, а продукты сгорания фильтруются через слой нагретого полукокса. Теплота для сушки и пиролиза исходного топлива поступает с выхлопными газами двигателя, который работает на продуктах га-

зификации. Подобные процессы реализуются и для кипящего слоя [8].

Появление в таких установках рециркуляции вещества и теплоты приводит к сложностям для инженерных расчетов режимов подобных процессов. Поэтому встает задача создания подходящей математической модели, которая позволит описать взаимосогласованную работу двух реакторов.

В работе [9] с помощью диффузионно-кинетической модели были рассчитаны распределения температуры и состава газа по высоте, однако начальные расходы газа и топлива были заданы. Такой подход может быть применен для объяснения наблюдаемых явлений, однако не может быть использован для прогнозирования работы установок.

В работе [10] для расчета всех реакторов применялась равновесная термодинамическая модель. За основу была принята схема, представленная на рис. 1. За счет простоты модели удалось теоретически рассчитать режимы работы всей совокупности реакторов. Однако термодинамические оценки обычно являются оценкой сверху – рассчитанные режимы могут оказаться недостижимыми на практике.



Рис. 1 – Схема процесса ступенчатой газификации угля (взято из работы [10])

В настоящей работе поводится расчет режимов ступенчатой газификации для этой же схемы. За основу принята модель одноступенчатого обращенного процесса газификации в плотном слое [11]. Эта модель сочетает в себе возможности кинетических и термодинамических моделей и при достаточно простой структуре позволяет получить информацию о распределении температур и состава газа по высоте слоя, при этом проводить варианты расчеты за приемлемое машинное время.

Математическая модель процесса ступенчатой газификации

Модель газификации твердых топлив в плотном слое

Модель одноступенчатой газификации подробно обсуждается в работе [11]. Для решения задачи распределения температур и состава газа по высоте слоя поочередно решаются задачи расчета теплообмена в продуваемом

слое и расчет равновесия с ограничением на скорость гетерогенных реакций.

Пространственно одномерная модель реактора строится исходя из следующих предположений. Геометрической координатой является высота реактора (пренебрегли неоднородностями в радиальном направлении). Цилиндрический реактор, наполненный топливом, разбит вдоль оси на конечное число элементарных объемов.

В качестве лимитирующих стадий рассматриваются гетерофазные процессы – сушка, пиролиз, реакции топлива с газообразными компонентами дутья. Блок расчета равновесия применяется в каждом элементарном объеме. В элементарных объемах температуру и давление считали постоянными, поэтому в качестве характеристической функции выбрана энергия Гиббса.

В модели учитывается конечная скорость теплообмена между газом, топливом и стенкой, а также теплотери в окружающую среду. В каждом элементарном объеме для газа, топлива и стенки записываются стационарные уравнения теплового баланса. Для описания теплотери задается коэффициент теплоотдачи между стенкой и окружающей средой. Тепловыделение, связанное с химической реакцией, находится как разность энтальпий между входящим и выходящим материальными потоками. Коэффициенты в модели зависят от условий протекания процесса, в т.ч. от температуры, поэтому задача существенно нелинейна.

Масса газифицированного топлива в каждом элементарном объеме рассчитывается на основе диффузионно-кинетической теории и данных по брутто-кинетики разложения топлива, которые получены методом термического анализа. Коэффициенты тепломассообмена в плотном слое рассчитывали по рекомендациям [12, 13].

Система дифференциальных уравнений приводится к разностному виду, а ее решение находится методом Ньютона.

Расчет стационарного состояния газогенератора проводится итерационно. На каждой итерации сначала с помощью термодинамической модели рассчитывается состав газовой и твердой фаз, который определяется протекающими химическими реакциями. Затем с учетом теплоты химических реакций находится распределение температур в слое. Процедура повторяется до тех пор, пока распределение

температур не перестает ощутимо меняться с итерациями. Подобный подход использовался в работе [14], однако только для слоя чистого углерода.

Модель ступенчатой газификации

Описанная выше модель газификации в плотном слое служит одиночным блоком для расчета режимов ступенчатой газификации. Состав и температура газов на выходе из камер сгорания считали равновесными. Для сжигания используется воздух при коэффициенте избытка окислителя 1,2. Предполагается, что все процессы протекают в условиях, мало отличающихся от изобарических (давление атмосферное), а перетоки массы и теплоты между реакторами происходят без потерь.

Для расчета стационарных режимов работы ступенчатого газогенератора используется метод простой итерации. В качестве начального приближения задается температура и расход продуктов сгорания генераторного газа в пиролизер (реактор №1). Эти величины уточняются после каждого расчета. Схема расчетного алгоритма представлена на рис. 2.

В первом реакторе за счет нагрева происходят сушка и пиролиз топлива. Пирогаз поступает в реактор №2 (надслоевое пространство в случае установки Viking), где полностью сгорает. Продукты сгорания пирогаза поступают в реактор №3, где реагируют с нагретым полукоксом. Часть газа после реактора газификации поступает в дополнительную камеру сгорания – реактор №4, в которой образуется газ-теплоноситель для реактора пиролиза.

В результате последовательного расчета начальные данные уточняются, и расчет повторяется снова.

Остановка алгоритма производится тогда, когда на двух последующих итерациях расход, состав и температура газа меняются меньше, чем на 5%. Модель реализована в среде MATLAB в виде связанных m-файлов.

Пример расчета реакционных зон пиролизера (реактор №1) и газификатора (реактор №3) представлен на рис. 3.

К стадии пиролиза относятся кривые рис. 3, а-в. Наблюдаемый излом – термодинамический эффект, связанный с переходом от преимущественного перехода водорода в молекулярную форму к образованию метана при понижении температуры.

В реальности такой переход вряд ли будет настолько резким, однако при отсутствии надежных экспериментальных данных по из-

менению состава газа в слое можно придерживаться такого рассмотрения.

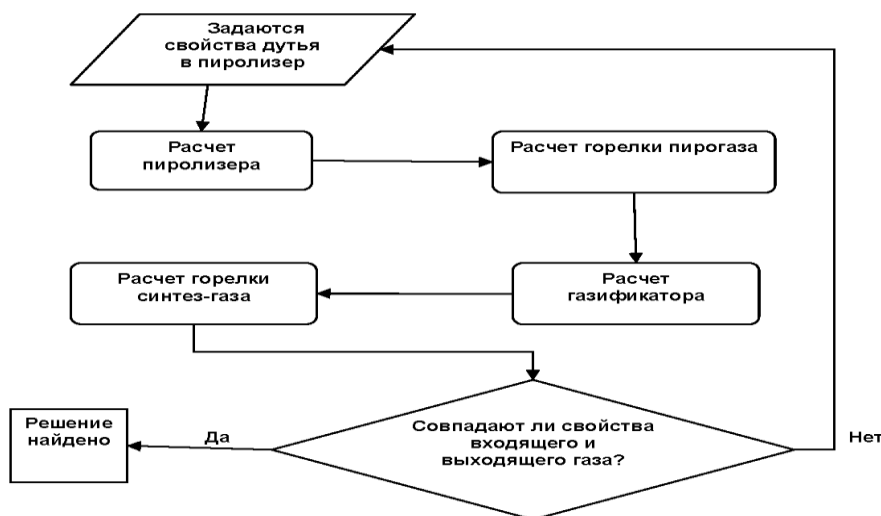


Рис. 2 – Схема алгоритма для расчета ступенчатого газогенератора

Данные, приведенные на рис. 3, *г-е* относятся к стадии газификации. Эндотермические реакции полукокса с CO_2 и H_2O приводят к понижению температуры и замедлению реакций, при этом преимущественно образуются CO и H_2 . При температурах ниже 1000 К реакции сильно замедляются, что соответствует опытным данным. В целом результаты расчетов показывают возможность применения модели для описания работы слоевых газогенераторов, работающих в аллотермических режимах.

Результаты расчетов

Естественным критерием эффективности процесса газификации является химический коэффициент полезного действия – КПДхим (степень превращения химической энергии топлива в химическую энергию горючего газа, или отношение теплоты сгорания газа к теплоте сгорания топлива, из которого он был получен). Этот критерий использовался и в настоящей работе для сравнения расчетных режимов ступенчатой газификации.

В первую очередь интересен вопрос об оптимальной доле рецикла горючего газа. Чем больше доля рецикла, тем больше теплоты возвращается в процесс, однако тем выше общий коэффициент избытка окислителя в системе. Для исследования совместного влияния

этих факторов были проведены расчеты с варьированием доли рецикла. Расчеты проводились для азейского угля (технические характеристики: $W^p = 20\%$; $A^d = 17\%$; $C^{daf} = 77.4\%$; $H^{daf} = 4.6\%$; $O^{daf} = 18\%$; $V^{daf} = 44\%$, средний размер частиц 30 мм); размеры реакционных зон реакторов (диаметр/высота слоя, м): пиролиза 1/1; газификации 1/1; расход топлива 1 т/ч. Коэффициент избытка окислителя в реакторе №2 был принят равным 1,2.

Как видно из рис. 4а, оптимальное значение доли рецикла составляет ок. 6-7%. Понижение этого значения приводит к нехватке теплоты на сушку и пиролиз топлива, поэтому горение затухает и процесс газификации прекращается – появляется значительный недожог, эффективность резко падает. При повышении доли рецикла до 15 % эффективность меняется незначительно, затем быстро уменьшается. При доле рецикла в 35 % процесс практически полностью затухает. Поскольку оптимальное значение доли рецикла находится в опасной близости к области потухания, реальный процесс нужно вести «с запасом», т.е. при значениях, превышающих оптимальное. При этом эффективность процесса уменьшается менее чем на 5 %, однако процесс будет более устойчивым к колебаниям характеристик топлива. Таким образом, можно рекомендовать диапазон изменения коэффициента рециркуляции синтез-газа от 7 до 15 %

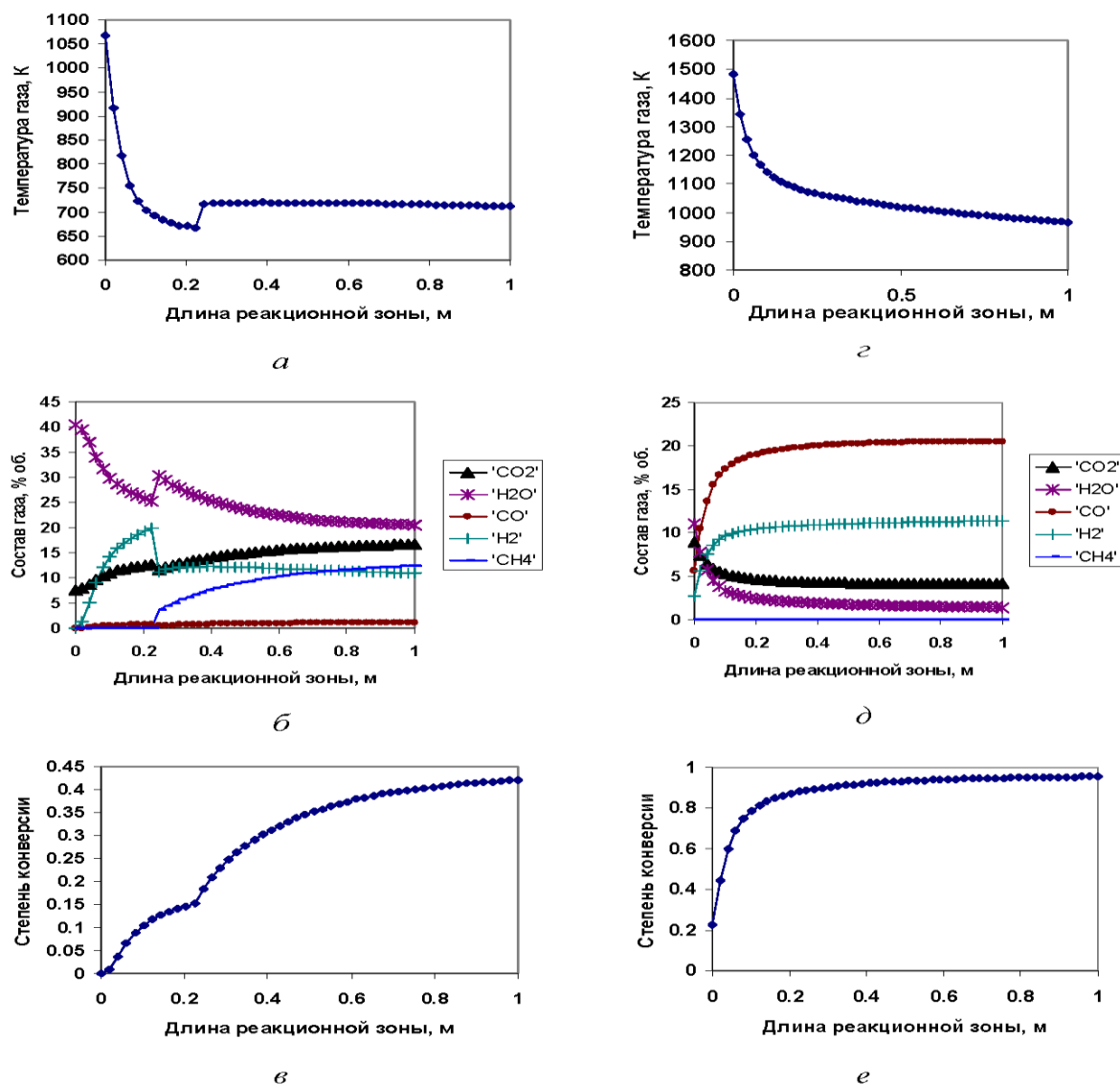


Рис. 3 – Профили температур и концентраций в слое топлива для пиролизера (а-б) и газификатора (z-e)

Важным вопросом также является организация полного сжигания пирогаза. Смолистые вещества при близких к стехиометрическому избытках окислителя могут сгорать не полностью, что может приводить к сажеобразованию, загрязнению газоходов и снижению эффективности. Исследования по сжиганию засмоленного газа требуют надежных экспериментальных данных и анализа кинетических путей превращения смолистых продуктов. В качестве одного из способов повышения эффективности горения высокомолекулярных соединений может быть предложено увеличение избытка окислителя по газу. В рамках данной работы было исследовано влияние коэффициента избытка окислителя в горелке пирогаза (реактор №2) на эффективность работы схемы. Результаты расчетов представлены на рис. 4б.

Видно, что в диапазоне избытков от 1 до 1,8 наблюдается плато эффективности, в пределах которого общий КПДхим процесса практически не зависит от коэффициента избытка окислителя. Это означает, что часть кислорода поступает в слой полукокса, что позволяет повысить температуру в слое и эффективность аллотермических реакций восстановления углекислоты и водяного пара. При избытках окислителя выше 2 эффективность падает, что говорит о сгорании части генераторного газа.

Необходимо отметить, что в нестационарных режимах работы (растопка газогенератора, изменение нагрузки) оптимальным может оказаться не ступенчатое изменение расходов топлива и окислителя, а квазистационарный переход через ряд промежуточных состояний.

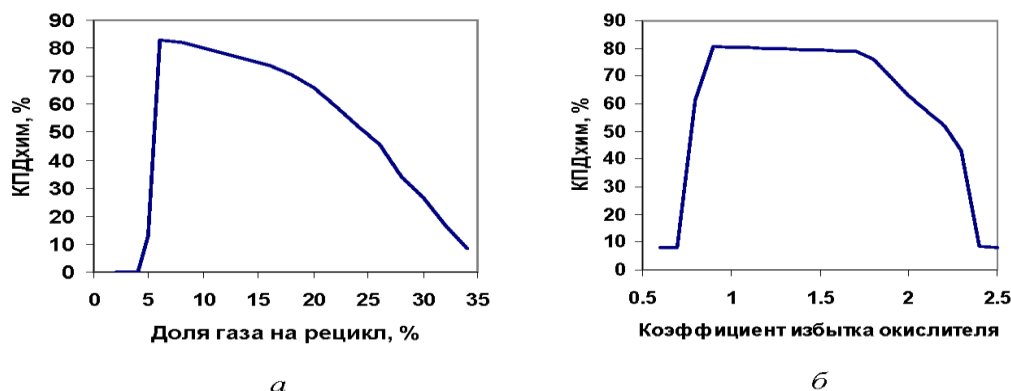


Рис. 4 – Зависимость КПДхим ступенчатой газификации от доли возвращаемого генераторного газа (а) и коэффициента избытка окислителя в реакторе №2 (б)

Этот вопрос, однако, здесь подробно не рассматривается, поскольку подходящим инструментом для исследования нестационарных процессов в подобных аппаратах мы на настоящий момент не располагаем.

В настоящее время решаются технические вопросы экспериментальной проверки разработанной математической модели на лабораторной установке.

Выводы

Полученные данные показывают, что для режимов ступенчатой газификации существуют области управляющих параметров, в которых, как ожидается, будут наблюдаться устойчивые термические режимы работы аппаратов. За счет обратной связи такие области могут быть достаточно широкими. При выходе за пределы этой области эффективность процесса резко падает.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 13-08-00281).

Литература

1. Кейко А.В., Ширкалин И.А., Свищев Д.А. Перспективные режимы газификации низкосортного твердого топлива // Известия АН. Энергетика. - 2006. - №3. - С. 55-63.
2. Исследование управляемости процессов слоевой термохимической конверсии твердого топлива / А.В. Кейко, Д.А. Свищев, А.Н. Козлов, И.Г. Донской // Теплоэнергетика. - 2012. - № 4. - С. 40-47.
3. Исследование процессов многозонной газификации биомассы / А.Ф. Рыжков, А.В. Попов, И.В. Рыжков, В.Е. Силин // Горение твердого топлива: Сб. докладов VI Всерос.

конф., Новосибирск, 8-10 ноября 2006 г. - Новосибирск.: Изд-во ИТ СО РАН, 2006. - Ч.3. - С. 126-136.

4. Попов А.В., Рыжков А.Ф. Управляемый процесс газификации биомассы // Промышленная энергетика. - 2008. - № 1. - С. 27-31.

5. Технологии газификации в плотном слое: Монография / Р.Ш. Загруднинов, А.Н. Нагорнов, А.Ф. Рыжков, П.К. Сеначин; под ред. П.К. Сеначина. - Барнаул: ОАО "Алтайский дом печати", 2009. - 296 с.

6. A new experimental Continuous Fixed Bed Reactor to characterise wood char gasification / L. Van de Steene, J.P. Tagutchou, F. Mermoud, E. Martin, S. Salvador // Fuel. - 2010. - V. 89. - P. 3320-3329.

7. The design, construction and operation of a 75 kW two-staged gasifier / U. Henriksen, J. Ahrenfeldt, T.K. Jensen, B. Gobel, J.D. Bentzen, C. Hindsgaul, L.H. Sorensen // Energy. - 2006. - V. 31. - P. 1542-1553.

8. Improving the performance of fluidized bed biomass/waste gasifiers for distributed electricity: A new three-staged gasification system / A. Gomez-Barea, B. Leckner, A.V. Perales, S. Nilsson, D.F. Cano // Applied Thermal Engineering. - 2013. - V. 50. - P. 1453-1462.

9. The development of a computer model for a fixed bed gasifier and its use for optimization and control / B. Gobel, U. Henriksen, T.K. Jensen, B. Qvale, N. Houbak // Bioresource Technology. - 2007. - V. 98. - P. 2043-2052.

10. Modelling a solid-fuel staged gasification process / A.V. Keiko, D.A. Svishchev, A.N. Kozlov, A.F. Ryzhkov // Proceedings of the 11th International Conference on Sustainable Energy Technologies (SET-2012), September 2-5, 2012. Vancouver, Canada. - 12 p.

11. Расчет режимов слоевой газификации угля с помощью термодинамической модели с макрокинетическими ограничениями / И.Г. Донской, А.В. Кейко, А.Н. Козлов, Д.А. Свищев, В.А. Шаманский // Теплоэнергетика. - 2013. - № 12. - С. 56-61.

12. Чуханов З.Ф. Некоторые проблемы топлива и энергетики. - М.: Издательство АН СССР, 1961. - 480 с.

13. Ковенский В.И., Теплицкий Ю.С. О теплопроводности зернистого слоя // Инженерно-физический журнал. - 2008. - Т. 81. - № 5. - С. 956-962.

14. Ковенский В.И. Об одном методе расчета слоевого горения коксового остатка твердого топлива // Теоретические основы химической технологии. - 2012. - Т. 46. - № 2. - С. 216-228.

MATHEMATICAL MODELING OF THE FIXED BED STAGED COAL GASIFICATION

I.G. Donskoy

Melentiev Energy Systems Institute of Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences,
664033, Irkutsk, Lermontova st., 130.

Abstract

The paper devoted to development of staged fixed bed coal gasification mathematical model. Staged gasification is a process with fuel conversion dissection into more than one step. In this work fuel consecutive pyrolysis (semicoking) and gasification process is concerned. Products of pyrolysis gas combustion are used as gasification agent. Heat needed for coal pyrolysis is produced by output syngas portion combustion. Such a process allow to produce tar-free syngas (for tar species burning after pyrolysis stage) and therefore to avoid expensive gas cleaning systems using. In connection with these advantages it is important to have a calculation tool for staged gasification process numerical research and optimization. There is recycling flow in staged gasification process scheme, so solution is found by the means of iterative procedure that specifies regime parameters stationary values. Raw coal pyrolysis and semicoke gasification reactors are calculated using previously developed fixed bed coal thermochemical conversion model. Gas combustion is supposed to achieve equilibrium for constant pressure and enthalpy. Mathematical model developed was applied to investigate controlling parameters influence. These parameters are syngas recycling and pyrogas combustion oxidizer excess coefficients. Calculation results show that there are ranges of the parameters values where stage gasification cold gas efficiency is slightly sloping function of them. Recycling coefficient decreasing lower than optimal value (6-7%) results in the lack of heat for pyrolysis and sharp process efficiency drop. By increasing of this parameter higher than 15% overall oxidizer excess rises so efficiency drops too. Pyrogas combustion oxidizer excess varying in a wide range (1-1,8) have no impact on process efficiency owing to useful unnecessary oxidizer consumption in gasification reactor.

ТЫҒЫЗ ҚАБАТТАҒЫ КӨМІРДІҢ САТЫЛЫ ГАЗИФИКАЦИЯСЫНЫҢ МАТЕМАТИКАЛЫҚ МОДЕЛІ

И.Г. Донской

Л.А. Мелентьев атындағы энергетикалық жүйе институты СБ РҒА, 664033, Иркутск, Лермонтов көш., 130,
donskoy.chem@mail.ru

Аннотация

Аталған жұмыс тығыз қабаттағы көмірдің сатылы газификациясының математикалық моделдеуді қарастырады. Сатылы газификация отынның қайта өндеу процесін бірнеше сатыға бөліп жобалауын қарастырады. Қарастырылып отырған жұмыста отынның сатылы түрде пиролизге және газификациялану процесіне көшуін сипаттайды. Газификация кезінде үрлеу процессіне пирогаздардың жанған өнімдері қолданылады. Көмірді пиролиздеуге кеткен жылуды алынған синтез-газды жағу арқылы іске асырады. Мұндай процесті ұйымдастыру құрамында шайырлары жоқ сапалы отын (көмірді) алуға мүмкіндік алады. Осы процеске байланысты газогенераторлардың сатылы жұмысы кезіндегі есептеулер мен жүйелі түрдегі жұмыспен қамту шараларын ұйымдастыру. Реакторлардағы ыстық газдардың жану кезіндегі есептер қалыпты жағдайдағы қысым мен энтальпияның тепе-теңдігінде термодинамикалық модельдер қолданылады.