

压力对喷动流化床煤气化影响数值模拟

邓中乙, 肖 睿, 金保升, 宋启磊

(东南大学 热能工程研究所, 江苏 南京 210096)

摘 要: 借助 CFD (Computational fluid dynamics) 软件平台首次建立了三维喷动流化床煤气化动力学模型。此模型包含了以下子模型: 气固流动模型, 煤的挥发分析出模型, 焦炭气化反应模型, 气相间的均相反应模型。此模型重点考察了操作压力的变化对煤气化的影响。当压力为 0.1 MPa 时, 一氧化碳, 氢气, 甲烷的摩尔分数分别为 8.75%, 10.5%, 3%, 压力为 0.3 MPa 时, 一氧化碳, 氢气, 甲烷的摩尔分数分别为 11.2%, 12.81%, 4.27%。煤气质量在加压后有了明显的提高, 并通过试验结果进行了验证。

关 键 词: CFD 模型; 煤气化; 加压喷动流化床; 数值模拟

中图分类号: TQ051.13; O242

文献标识码: A

引 言

煤炭是我国的能源结构中占有重要地位, 但在利用过程中容易产生大量的污染物, 因此实现煤的高效低污染转化具有十分重要的意义。煤气化技术是未来洁净煤发电技术的基础, 如整体煤气化联合循环, 第二代增压流化床联合循环, 整体煤气化——燃料电池和以煤气化为核心的多联产系统等等, 国内外研究者对此进行大量的研究工作。依据煤的不同组分和不同转化阶段的反应特性不同的特点, 采用温和的部分气化方式将煤中高活性的部分转化成煤气, 残余的低活性半焦碳通过燃烧方式加以利用, 从而在总体投资和运行成本降低的前提下, 达到提高系统碳利用率的目的, 第二代增压流化床联合循环发电技术正是基于此。东南大学在对新一代 PF-BC 系统的设计中, 其前置气化炉采用喷动流化床技术。喷动流化床兼有固定床、流化床和气流床的特点, 建立模型对煤种适应性宽、不易结焦、气固接触特性好, 是适应此种气化的较佳选择。

近年来, 随着计算方法的改进和计算机硬件条件的提高, CFD 模型被证明是一种有效的优化和分

析手段, 在许多领域得到了广泛的应用。Frazeli 利用 CFD 工具建立了甲烷重整反应模型^[1]。Ravelli 利用 Fluent 6.1 建立了鼓泡流化床 RDF (refuse-derived fuel) 燃烧模型^[2], 但在煤气化领域的应用尚未见报导。鉴于此, 近期由于计算软件的发展, 本研究利用 CFD 软件平台, 结合欧拉双流体模型计算喷动流化床流场, 在此基础上利用软件提供的用户自定义方程 (UDF) 加入化学反应模块从而建立了加压煤部分气化炉 3D 整体反应动力学模型。

1 数学模型

本文的模型以化学动力学为基础, 为简化模型, 作以下说明和假设:

- (1) 此模型为三维模型;
- (2) 床料、焦炭具有同样的粒径, 无粒径分布, 且反应过程中粒径不变。
- (3) 假设煤的挥发份析出是一个瞬时的过程。
- (4) 本模型只考虑甲烷的燃烧反应, 不考虑生成甲烷的加氢气化反应和甲烷化反应。
- (5) 取无滑移的壁面条件, 时间步长为 2×10^{-4} 。

1.1 气固流体力学方程

1.1.1 连续性方程

$$\text{气相: } \frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\epsilon_g \rho_g V_g) = S_{gs}$$

$$\text{固相: } \frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_s \rho_s) + \nabla \cdot (\epsilon_s \rho_s V_s) = S_{sg}$$

式中: ϵ —体积份额; ρ —密度, kg/m^3 ; V —瞬时速度, m/s 。等式右边的 S 表示源项, 当只有流场时设为零, 当有异相反应时, 在气相和固相之间存在质量、动量及热量交换。

1.1.2 动量方程

收稿日期: 2008-05-06; 修订日期: 2009-03-25

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (50606006)

作者简介: 邓中乙 (1982-) 男, 江苏宿迁人, 东南大学博士研究生。

$$\text{气相: } \frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_g \rho_g V_g) + \nabla \cdot (\epsilon_g \rho_g V_g V_g) = -\epsilon_g \nabla P + \epsilon_g \rho_g g + \nabla \epsilon_g \cdot \tau_g - \beta(V_g - V_s) + S_{gs} u_s$$

$$\text{固相: } \frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_s \rho_s V_s) + \nabla \cdot (\epsilon_s \rho_s V_s V_s) = -\epsilon_s \nabla P + \epsilon_s \rho_s g - \nabla P_s + \nabla \epsilon_s \cdot \tau_s + \beta(V_g - V_s) + S_{sg} u_s$$

式中: β —曳力系数, $\text{kg}/(\text{m}^3 \text{s})$, g —重力加速度, m/s^2 ; u_s —颗粒平均速度, m/s 。

1.1.3 能量方程

多相流的传热通过气相和固相的焓值进行计算:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_g \rho_g H_g) + \nabla \cdot (\epsilon_g \rho_g u_g H_g) = \nabla (\lambda_g \nabla T_g) + Q_{gs} + S_{gs} H_s$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_s \rho_s H_s) + \nabla \cdot (\epsilon_s \rho_s u_s H_s) = \nabla (\lambda_s \nabla T_s) + Q_{sg} + S_{sg} H_s$$

式中: H —焓, J/kg ; λ —混合物热传导率, $\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$; Q —气相和固相间的热交换, W/m^2 , 公式右边第三项为固相变为气相时带来的热量。

1.2 化学反应模型

煤气化化学反应主要包括如下三个过程: (1) 挥发分析出; (2) 气固异相反应; (3) 气体均相反应。

1.2.1 挥发分析出模型

由于喷动流化床传热速率高和良好的气固混合, 煤中挥发分析出的时间与气化反应相比要少得多, 研究煤气化的模型中许多都假定挥发分进入炉膛内立即释放。本模型采用动力学平衡模型来描述挥发分释放后的产物分布, 然后与其它子模型结合, 进行模拟计算, 因此该模型可进行多组分的热解产物的计算^[3~4], 具有一定的通用性:

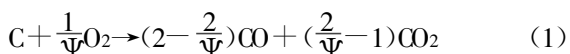
$$\text{Volatile} \rightarrow \alpha_1 \text{CO}_2 + \alpha_2 \text{CO} + \alpha_3 \text{CH}_4 + \alpha_4 \text{H}_2 + \alpha_5 \text{H}_2\text{O}$$

$$\sum \alpha_i = 1$$

1.2.2 焦炭气固非均相反应

在本模型中, 焦炭的气固非均相反应包含三个反应: 焦炭的燃烧反应, 焦炭和水蒸气的反应, 焦炭和二氧化碳的反应(Boudouard 反应)。关于焦炭与氧气, 水蒸气和二氧化碳的反应机理国外学者有不同的描述^[5~6], 在本文中, 我们假设焦炭的非均相反应速率是由气体的扩散和化学反应动力学共同控制^[7]。

燃烧反应:



碳与水蒸气的反应:



二氧化碳的还原反应(Boudouard reaction):



式中: φ —机理因子, 一些研究已确定 φ 是温度、颗粒大小和碳类型相关的函数, 较小的颗粒粒径和较高的反应温度有利于 CO 的生成; 反之, 则有利于 CO_2 的生成。对其的选取, 可利用 Ross 的计算方法^[8]:

$$\varphi = \begin{cases} \frac{2Z+2}{Z+2} & d_p \leq 0.05 \text{ cm} \\ \frac{2Z+2 - \frac{Z}{0.095}(100d_p - 0.05)}{Z+2} & 0.05 \text{ cm} \leq d_p \leq 0.1 \text{ cm} \\ 1.0 & d_p \geq 0.1 \text{ cm} \end{cases} \quad (4)$$

$$\text{其中, } Z = 2500 \exp\left\{\frac{-6249}{T_p}\right\}$$

焦炭的燃烧和气化反应同时考虑化学反应及气体的扩散, K_{dif} 可由下式计算:

$$K_{\text{dif}} = \frac{Sh D_{\text{gs}}}{d_p}, \quad D_{\text{gs}} \text{—气体的扩散系数。} \quad (5)$$

表征颗粒传质特性的 Sherwood 数受颗粒和气体流动的影响。本模型按以下的计算式进行计算:

$$Sh = 2 + 0.654 Re^{0.5} Sc^{1/3}, \quad (Re = \frac{u d_p \rho_p}{\mu},$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho_g D_g}) \quad (6)$$

焦炭的燃烧和气化反应的速率方程可由下式计算:

$$r_c = \frac{6 V_c K_c P X_i}{d_p} \quad (7)$$

$$K_c = 1 / \left(\frac{1}{K_{si}} + \frac{1}{K_{\text{dif}}} \right) \quad (8)$$

K_{si} —表面反应速率常数, 取值如表 1 所示^[7]。

表 1 焦炭非均相反应的表面反应速率常数

反应	单位	方程
(1)	$\text{Pa}^{-1} \text{s}^{-1}$	$K_{s,1} = 17.9 \exp[-13750/T_p]$
(2)	$\text{Pa}^{-1} \text{s}^{-1}$	$K_{s,2} = 5.95 \times 10^{-5} \exp[-13650/T_p]$
(3)	$\text{Pa}^{-1} \text{s}^{-1}$	$K_{s,3} = 3.92 \exp[-26927/T_p]$

以上反应速率计算式中, V —颗粒的体积, m^3 ; T_p —颗粒表面温度, K ; d_p —颗粒的直径, m ; P —气体组分的分压力, Pa ; X_i —气体组分的摩尔分数。

1.2.3 气体均相反应

对于气体均相反应, 由于流化床内湍流运动十分强烈, 因而可燃气体与氧气混合良好, 反应时不考虑气体间的传质和混和问题, 而认为气相间的反应完全由反应动力因素控制。上述反应可作为二级反

应来处理。除了气体燃烧反应以外, 水气置换反应也按二级反应来处理。各反应的反应速率为:

$$r_i = A_{gi} \exp\left(-\frac{E_{gi}}{RT}\right) C_A C_B \tag{9}$$

气体均相各反应式的动力学参数如表 2 所示^[9]。

表 2 气体均相反应的动力学参数

反应	频率因子 $A/\text{m}^3\cdot(\text{kmol}\cdot\text{s})^{-1}$	活化能 E_{gi} $/\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$
$\text{CO} + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$	3.09×10^5	9.976×10^4
$\text{H}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$	8.83×10^8	9.976×10^4
$\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$	2.552×10^{14}	9.304×10^5
$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	2.978×10^{12}	3.69×10^5
$\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	6.245×10^{14}	3.983×10^5

2 计算工况及网格划分

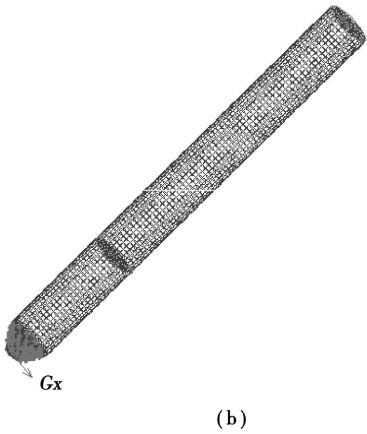
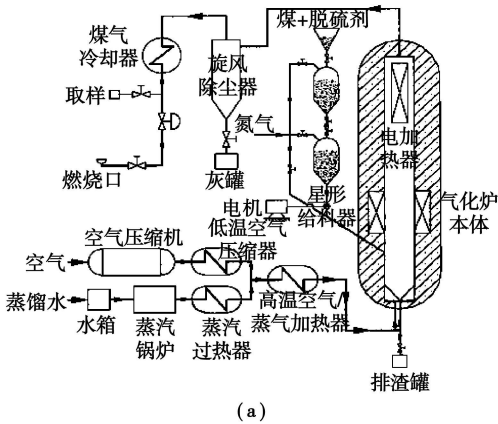


图 1 试验流程图及三维网格划分

模型以热输入为 0.1 MW 的喷动流化床气化炉为对象^[10], 试验流程如图 1 所示, 图 1(b)为喷动流化床的网格划分示意图。试验结果如表 4 所示^[11]。喷动流化床气化炉是由上部柱体和下部锥体构成。

网格上部圆柱体采用规则的四面体网格, 下部采用三角形网格数量约为 5.6 万。对于此模型, 进口采用速度入口边界条件, 出口采用质量出口边界条件。对于壁面, 采用无速度滑移和无质量渗透条件; 本文模拟的试验煤种为徐州烟煤, 工业分析和元素分析如表 5 所示, 计算工况如表 3 所示。

表 3 计算工况参数

	工况 1	工况 2	工况 3
加煤量/ $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$	4.2	4.6	5.87
空气量/ $\text{m}^3\cdot\text{h}^{-1}$	7.8	7.5	9.4
蒸汽量/ $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$	1.15	1.24	1.6
压力/MPa	0.1	0.2	0.3
空气、蒸汽入炉温度/ $^{\circ}\text{C}$	534	549	557
气化炉温度/ $^{\circ}\text{C}$	860	860	893

表 4 试验数据

	工况 1	工况 2	工况 3
CO	8.32	10.05	11.37
H ₂	9.76	11.97	12.97
CH ₄	2.40	3.08	4.00
CO ₂	15.23	15.24	16.18
N ₂	64.29	59.66	56.15

3 模拟结果与分析

为了方便简洁的对模拟的结果进行分析, 在这里取纵向截面 $Y=0$ 来进行描述。

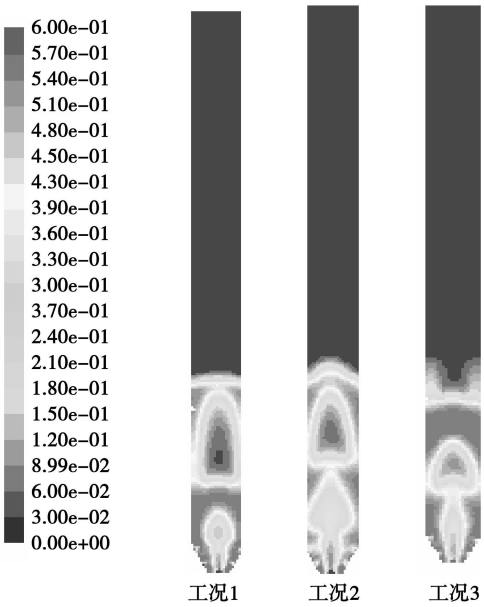
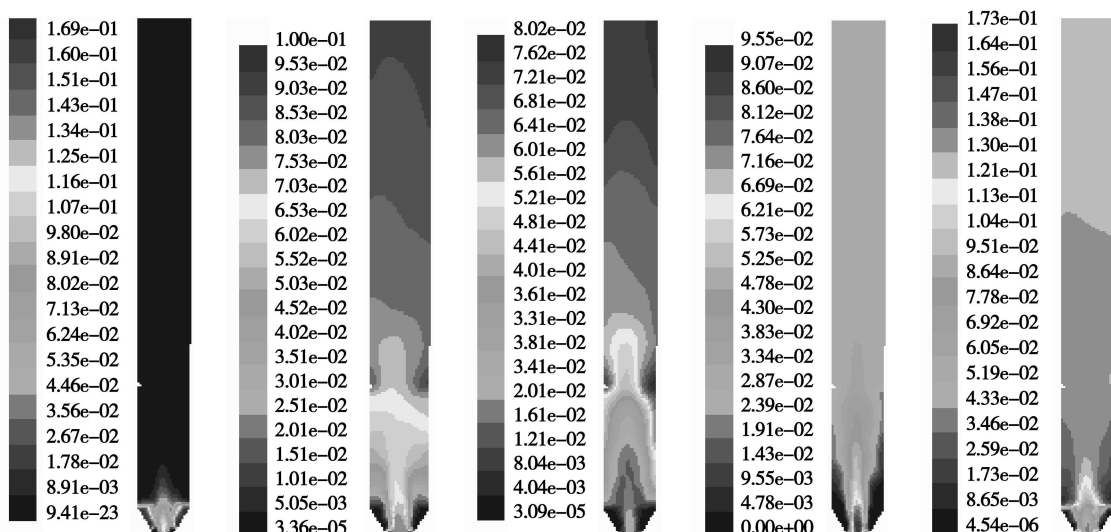
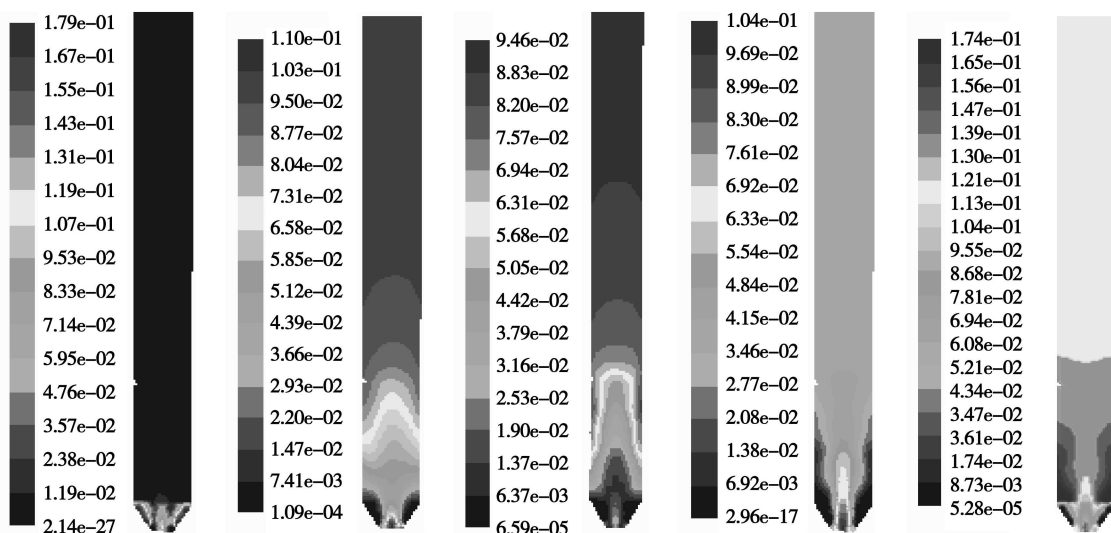


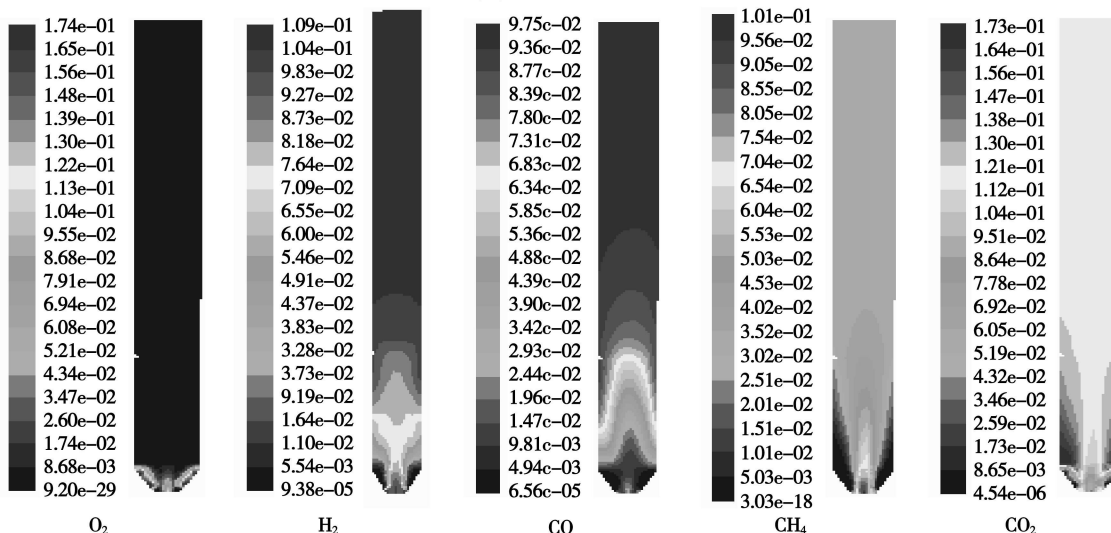
图 2 不同工况下固相体积浓度分布



(a) 工况1 组分分布



(b) 工况2 组分分布



(c) 工况3 组分分布

图 3 不同工况下 O₂, H₂, CO, CH₄ 和 CO₂ 的分布

表 5 煤的工业分析和元素分析

工业分析	数值/%
水分	1.16
挥发分	26.93
固定碳	46.01
灰分	25.90
元素分析	数值/%
C _{ad}	57.86
H _{ad}	3.77
O _{ad}	8.7
N _{ad}	1.11
S _{ad}	1.50
M _{ad}	1.16
A _{ad}	25.9
低位发热量/kJ·kg ⁻¹	23 220

图 2 表明了床内固相和气相体积浓度分布。在加压下, 气泡体积变小, 形状扁平且在床内均匀分布, 相同的床料和风速下, 流化更均匀, 环形区和喷动区之间的传热和传质更均匀, 气固接触性变好, 导致气化剂在床内停留时间变长。

图 3 表明了气体各组分浓度的分布。不同工况下浓度分布的趋势大体一致。例如氧气的浓度沿着床高的方向很快消耗完毕, 这表明燃烧反应速率很快。同时在反应器底部二氧化碳的浓度一直在增加, 并达到了最高值。CO₂ 在床层下部环形区浓度高于喷动区, 说明生成二氧化碳的燃烧反应主要集中在环形区。

随着氧气的消耗完毕, 焦炭和水蒸气、二氧化碳的反应成为主要的反应, 如图 3 所示, 沿着反应器的高度方向, 氢气和一氧化碳的浓度逐渐增加, 而二氧化碳的浓度在降低。因为在本模型中只考虑甲烷的燃烧反应, 不考虑生成甲烷的甲烷化反应, 所以甲烷的浓度是喷口入口处最高, 随着床高的增加逐渐减少。从图中还可以发现, 在自由空间里, 各组分气的

浓度基本保持稳定, 说明在自由空间基本上不发生化学反应。

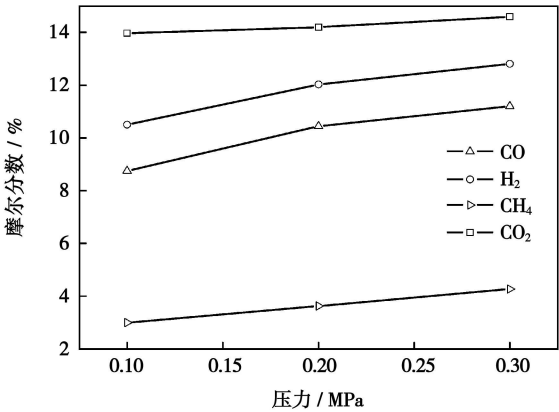


图 4 不同压力下各组分的摩尔分数的比较

由图 4 与图 5 可以看出随着操作压力的提高, 煤气的质量也有了很大的提高, 在压力为 0.1 MPa 的条件下, 一氧化碳, 氢气, 甲烷的摩尔分数分别为 8.75%, 10.5%, 3%, 而在压力为 0.3 MPa 的条件下, 一氧化碳, 氢气, 甲烷的摩尔分数分别为 11.2%, 12.81%, 4.27%, 均有了大幅度的提高。这是因为, 在增压下, 气泡体积变小, 形状扁平且在床内均匀分布, 相同的床料和风速下, 流化更均匀, 环形区和喷动区之间的传热和传质更均匀, 内循环更稳定, 气固接触性变好, 且气化剂在床内停留时间变长, 且在加压条件下反应物浓度也增大了, 所有的这些条件使得煤气质量在加压后有了明显的提高。

图 5 同时也给出了模拟值和试验值之间的对比, 工况 1 中各组分最大的误差是甲烷的计算误差, 达到了 25%, 工况 2 中各组分最大的误差也是甲烷的计算误差, 为 17.8%。由此可见本模型中关于甲烷的模型存在一定的偏差, 还有待改进。绝大部分的计算误差均在 10% 以内, 可以说模型计算的结果很好地验证了试验的结果。

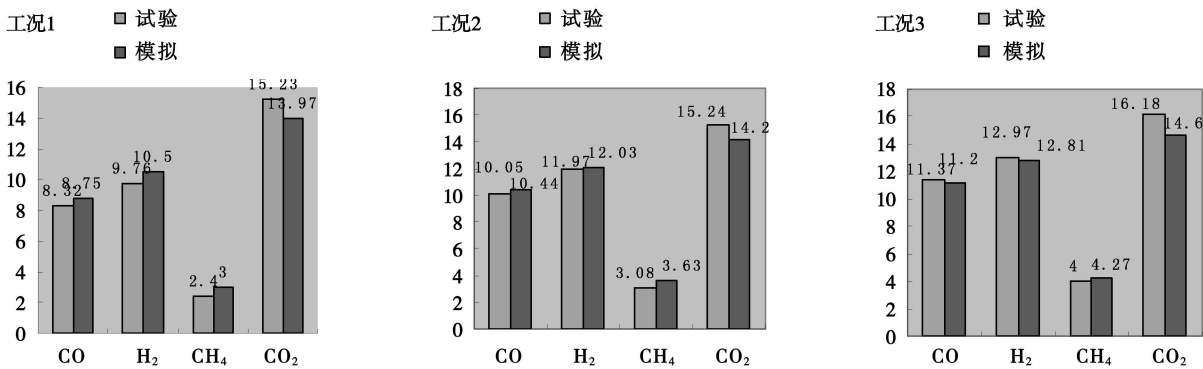


图 5 模拟值与试验结果的对比

图 6 表明了不同工况下反应器内温度的分布的趋势(取纵向截面 $Y=0$ 和横向截面 $Z=0.04$)。从图中看出,随着加煤量和空气量的增加,反应器内的温度随之升高。但是三种工况下的温度分布的趋势基本一致,中心喷动区温度明显高于周边环形区,密相区的温度高于悬浮段。入口射流有一个非常明显的高温火焰,并且沿着床高的方向温度逐渐降低。在入口处,氧气进入反应器内,沿着床高的方向上发生剧烈的燃烧反应并逐步被消耗完毕。当氧气消耗完以后,焦炭和水蒸气,二氧化碳的非均相反应此时占据了主要的地位。因为焦炭与水蒸气,二氧化碳的反应是吸热反应,所以温度场沿着床高方向逐渐降低。

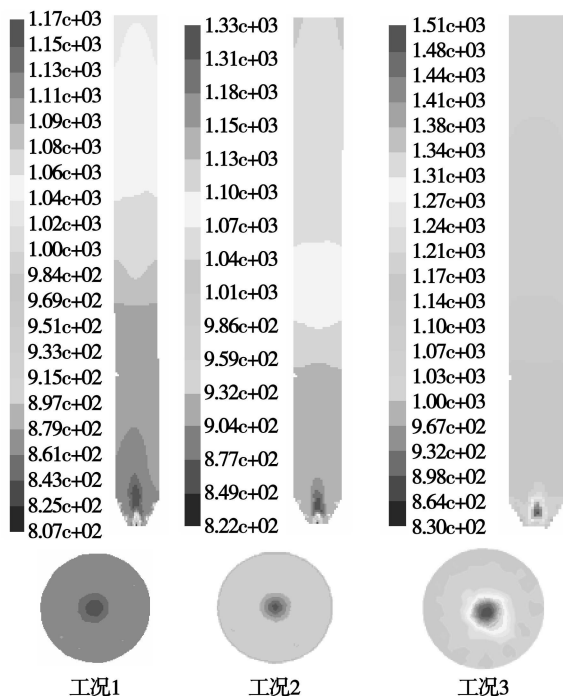


图 6 不同工况的温度分布

4 结 论

在东南大学的新一代 PFBC 系统的基础上,借助 CFD 平台构建了三维非稳态的喷动流化床气化动力学模型,在常压和增压的操作条件下进行了数值模拟,模拟的结果和试验结果进行了对比,验证了模型的正确性,并分析了压力的变化对煤气化的影响。

(1) 入口中心喷动区的温度最高。当氧气消耗完以后,焦炭和水蒸气,二氧化碳的反应占据了主导地位。因为焦炭与水蒸气,二氧化碳的反应是吸热反应,所以温度场沿着床高方向逐渐降低。

(2) 煤气质量在加压后有了明显的提高,当压力为 0.1 MPa 时下,一氧化碳,氢气,甲烷的摩尔分数分别为 8.75%, 10.5%, 3%, 压力为 0.3 MPa 时,一氧化碳,氢气,甲烷的摩尔分数分别为 11.2%, 12.81%, 4.27%。主要是由于气固混合改善,以及加压下反应物浓度增加影响气化反应所致。

参考文献:

- [1] FRAZELI A, BEHNAM M. CFD modeling of methane autothermal reforming in a catalytic microreactor[J]. International Journal of Chemical Reactor Engineering, 2007, 5: Article A93.
- [2] RAVELLI S, PERDICHIZZI A, BARIGOZZI G. Description, applications and numerical modelling of bubbling fluidized bed combustion in waste-to-energy plants[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2008, 34 (2): 224-253.
- [3] CHO HC. A numerical study on parametric sensitivity of the flow characteristics on pulverized coal gasification[J]. Int J Energy Res, 2000, 24 (6): 511-523.
- [4] LEE J L, KIM Y J, LEEW J, et al. Coal-gasification kinetics derived from pyrolysis in a fluidized reactor[J]. Energy, 1998, 23(6): 475-488.
- [5] EATON AM, SMOOT LD, HILL SG, et al. Components, formulations, solutions, evaluation, and application of comprehensive combustion models[J]. Progr Energy Combust Sci, 1999, 25(4): 387-436.
- [6] CHEN CX, HORIO M, KOJIMA T. Numerical simulation of entrained flow coal gasifiers. Part I: modeling of coal gasification in an entrained flow gasifier[J]. Chem Eng Sci, 2000, 55(18): 3861-3874.
- [7] LIANG YU, JING LU, XIANGPING ZHANG. Numerical simulation of the bubbling fluidized bed coal gasification by the kinetic theory of granular flow (KTGF)[J]. Fuel, 2007, 86(5): 722-734.
- [8] SMOOT L D, PRATT D T. Combustion & gasification of pulverized coal [M]. Translated by Fu Weibiao, et al. Beijing: Tsinghua University Press, 1983.
- [9] HURT R H, CAIO J M. Semi-global intrinsic for char combustion modeling[J]. Combustion and Flame, 2001, 125(3): 1138-1149.
- [10] 李乾军, 章名耀, 施爱阳. 加压喷动流化床煤部分气化试验[J]. 东南大学学报, 2006, 36(5): 765-768.
- [11] 李乾军. 加压喷动流化床煤部分气化特性试验研究及其数值模拟[D]. 南京: 东南大学, 2007.

(编辑 滨)

west Polytechnic University, Xi'an, China, Post Code: 710072), JIA Hai-tao, (CSIC Harbin No. 703 Research Institute, Harbin, China, Post Code: 150036) // Journal of Engineering for Thermal Energy & Power. — 2009, 24(4). — 519 ~ 522

In the light of the meshing characteristics of herringbone gears, established was a model for load-bearing contact analysis of such gears. First, a finite element method was used to calculate and obtain flexibility coefficients at various grid nodes on the working tooth surface and also the flexibility coefficients through an interpolation at all the long-axis discrete points on the transient contact ellipse during the gear engagement period. On the basis of the gear engagement at various contact locations, a normal flexibility matrix was constituted at the contact points on the tooth surface. Moreover, through a superimposition, a tooth surface normal flexibility matrix of the gear pair was obtained. By taking account of the influence of shaft deformation on the tooth surface flexibility matrix, the additional matrix produced by the shaft deformation was added to the tooth surface normal flexibility matrix to obtain a flexibility matrix of the gear system. Then, based on the gear tooth deformation and displacement coordination equation, the force equilibrium conditions and non-insertion conditions were introduced to establish a mathematical programming model for the contact problem of herringbone gears. Finally, with a pair of herringbone gears under test serving as an example, through a comparison of load-bearing transmission errors (the measured amplitude and theoretical one are 0.451 669 and 0.439 radial second respectively, the difference between the two is very small), the correctness of the established model was verified. **Key words:** herringbone gear, load-bearing contact, normal flexibility matrix, programming

压力对喷动流化床煤气化影响数值模拟 = Numerical Simulation of the Influence of Pressure on the Coal Gasification in a Spouted Fluidized Bed [刊, 汉] / DENG Zhong-yi, XIAO Rui, JIN Bao-sheng, SONG Qi-lei (Energy Source Research Institute, Southeast University, Nanjing, China, Post Code: 210096) // Journal of Engineering for Thermal Energy & Power. — 2009, 24(4). — 523 ~ 528

With the aid of a CFD (Computational Fluid Dynamics) software platform, established for the first time was a three-dimensional gasification dynamic model for a spouted fluidized bed. The model included the following sub-models: those for gas-solid flow, coal volatile precipitation and coke gasification reaction, as well as a homogeneous reaction sub-model between gas phases. The model was mainly used to investigate the influence of the change of operating pressure on coal gasification. When the pressure is 0.1 MPa, the mole fractions of carbon monoxide, hydrogen and methane are 8.75%, 10.5% and 3% respectively. When the pressure is 0.3 MPa, the mole fractions of the above items are 11.2%, 12.81% and 4.27% respectively. The quality of coal gas was improved significantly after being pressurized. Finally, the simulation calculated results were verified by test ones. **Key words:** CFD (Computational Fluid Dynamics) model, coal gasification, pressurized spouted fluidized bed, numerical simulation

富钒石煤与生物质在 CFBC 试验台上的混烧实验 = Mixed Combustion Experiment of Vanadium-enriched Stone Coal and Biomass on a CFBC (Circulating Fluidized Bed Combustion) Test Rig [刊, 汉] / FAN Xiao-xu (Energy Source Research Institute, Shandong Provincial Academy of Sciences, Jinan, China, Post Code: 250014), NA Yong-jie, LU Qing-gang (Research Institute of Engineering Thermophysics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China, Post Code: 100190), WANG Zhou-ming (Shandong Provincial Development and Investment Co. Ltd., Jinan, China, Post Code: 250014) // Journal of Engineering for Thermal Energy & Power. — 2009, 24(4). — 529 ~ 532

In the light of the specific features of vanadium-enriched stone coal and by utilizing a laboratory-scale CFB (circulating fluidized bed) combustion plant, a mixed combustion experiment was carried out for the stone coal in question and biomass. It was aimed at the comprehensive utilization of resources through vanadium enrichment and heat recovery. The test results show that the stone coal under test is easy to ignite, maintains a steady combustion and displays good burn-out characteristics. This is also the case even when the stone coal is fired with biomass in a mixed combustion. After combustion, the majority of vanadium in the stone coal was transformed to V_2O_5 and became enriched in ash and slag. The stone