



Wybrane zagadnienia modelowania procesu spalania paliw stałych w warunkach modyfikowanej atmosfery

Robert Lewtak

Warszawa 2024, wyd. I

ISBN 978-83-63226-34-3

Oprawa twarda, 212 str., tabl., il., bibliogr.

Cena podstawowa: **50 zł** z VAT + koszty przesyłki

Streszczenie

Tematyka przedstawiona w niniejszej monografii dotyczy głównie zagadnień wynikających ze zmian w mechanizmie spalania paliw w atmosferze modyfikowanej. Ze względu na modyfikację składu utleniacza mechanizm spalania, oprócz reakcji utleniania, jest również uzupełniany o dodatkowe reakcje zgazowania dla paliw stałych i reakcje reformingu dla paliw gazowych. Autor zwrócił również szczególną uwagę na zagadnienia związane z procesem dyfuzji wokół cząstki paliwa stałego spalanej w atmosferze modyfikowanej.

Rozdział 1 stanowi zwięzłe wprowadzenie do obszernych zagadnień związanych z przemysłowym zarządzaniem emisjami CO₂, w szczególności z wykorzystaniem technologii wychwytywania i składowania CO₂. Zaprezentowano m.in.: metody wychwytywania CO₂ przed i po procesie spalania oraz metodę spalania tlenowego zintegrowaną z wychwytywaniem CO₂. Najważniejsze różnice wynikające ze zmiany atmosfery konwencjonalnej na zmodyfikowaną podczas procesu spalania.

W rozdziale 2 przedstawiono podstawowe definicje, parametry i zależności opisujące stan układu termodynamicznego będącego wieloskładnikową mieszaniną gazów doskonałych, będącego przedmiotem niniejszej monografii. Omówiono podstawowe równania opisujące prawa zachowania ośrodka ciągłego, tj. zasadę zachowania masy, zasadę zachowania pędu oraz zasadę zachowania energii. Ze względu na zmianę warunków dyfuzji w procesie spalania w atmosferach modyfikowanych, istotne było również omówienie podstaw, czyli równań Maxwella-Stefana i Ficka rządzących procesem dyfuzji składników gazowych w mieszaninie. Wprowadzono uproszczenia w opisie procesu dyfuzji w postaci efektywnego współczynnika dyfuzji. Przedstawiono równania określające szybkość spalania jednorodnej cząstki paliwa stałego w konwencjonalnych warunkach spalania w powietrzu. Na przykładzie reakcji utleniania cząstki węgla w niemodyfikowanej atmosferze wprowadzono pojęcia równomolowej i nierównomolowej dyfuzji przeciwkierunkowej.

W rozdziale 3 przedstawiono model matematyczny oraz wyniki symulacji numerycznych i badań eksperymentalnych nad procesem spalania pojedynczej cząstki paliwa stałego w powietrzu i w atmosferze modyfikowanej. Do badań wykorzystano węgiel kamienny. Opracowany model matematyczny opisuje procesy zachodzące wokół i wewnątrz palącej się cząstki węgla, która w modelu traktowana jest w uproszczony sposób jako dyskretna cząstka Lagrange'a. Model uwzględnia procesy zachodzące podczas spalania cząstki węgla, tj. ogrzewanie, odgazowywanie i spalanie pozostałości po węglu, które są opisane w postaci równań zachowania masy i energii. Mechanizm reakcji spalania obejmował reakcje utleniania powierzchniowego i zgazowania cząstki pozostałości koksu oraz reakcje spalania w fazie gazowej wokół cząstki. Odpowiednie strumienie masy i ciepła wymieniane w procesie spalania pomiędzy cząstką a jej gazowym otoczeniem traktowane są jako warunek brzegowy dla równań różniczkowych cząstkowych opisujących zasadę zachowania masy, pędu i energii dla

ośrodka gazowego otaczającego cząstkę. Założenie symetrii sferycznej w rozważanym obszarze obliczeniowym wokół palącej się cząstki węgla umożliwiło przeprowadzenie niestacjonarnych symulacji numerycznych w przestrzeni jednowymiarowej. Równania różniczkowe cząstkowe opisujące proces spalania w fazie gazowej, zdyskretyzowanej w obszarze jednowymiarowym, stworzyły odpowiednie układy z macierzą trójdziagonalną, których rozwiązanie numeryczne uzyskano za pomocą szybkiego i bezpośredniego algorytmu Thomasa dla macierzy trójdziagonalnej. Do numerycznego rozwiązania sprzężonych równań zachowania masy, pędu i energii dla fazy gazowej zastosowano nieiteracyjną metodę ICE (Implicit Continuous-fluid Eulerian), w której przyjęto niestacjonarny warunek brzegowy zdefiniowany przez numeryczne rozwiązanie zwykłych równań różniczkowych opisujących ewolucję masy i temperatury palącej się cząstki węgla. Uzyskane wyniki numeryczne dobrze odwzorowują wszystkie procesy zachodzące podczas rzeczywistego procesu spalania cząstek węgla zarejestrowanych podczas badań doświadczalnych. Ponadto analiza wyników numerycznych ujawniła istotne, niemierzalne i niedostrzegalne zjawiska i mechanizmy zachodzące podczas spalania cząstki węgla. Oprócz procesów podgrzewania, odgazowywania i spalania pozostałości koksu opisano zjawisko nieciągłego zapłonu części lotnych, zmiany stężenia składników gazowych wokół powierzchni spalania części lotnych oraz opóźnienie zapłonu pozostałości koksu po zakończeniu spalania części lotnych.

W rozdziale 4 przedstawiono model matematyczny oraz wyniki symulacji numerycznej procesu spalania pozostałości koksu. Model matematyczny opisuje mechanizm spalania pozostałości koksu w atmosferze modyfikowanej, z uwzględnieniem reakcji utleniania powierzchniowego do CO i CO₂ oraz reakcji zgazowania powierzchniowego przez CO₂ i H₂O. Poszczególne strumienie reagentów gazowych i gazowych produktów reakcji utleniania i zgazowania są ze sobą połączone, tworząc nierównomolową dyfuzję przeciwkierunkową wokół spalanej cząstki pozostałości koksu. Proces dyfuzji gazowych reagentów reakcji powierzchniowych opisano za pomocą równań Maxwella-Stefana zredukowanych do równań Ficka z efektywnym współczynnikiem dyfuzji dla wszystkich składników gazowych. Poszczególne powierzchniowe reakcje utleniania i zgazowania opisano za pomocą globalnego modelu reakcji n-tego rzędu, w którym strumienie reagentów gazowych dyfundujące w kierunku powierzchni cząstki pozostałości koksu są strumieniami substratów gazowych odpowiednich reakcji powierzchniowych. Na potrzeby analizy przyjęto również model dyfuzji równomolowej przeciwkierunkowej, w którym poszczególne strumienie dyfundujących substratów gazowych reakcji powierzchniowych nie są ze sobą sprzężone. Walidację opracowanego modelu matematycznego sprawdzono poprzez porównanie otrzymanego rozwiązania numerycznego uwzględniającego model równomolowej i nierównomolowej dyfuzji przeciwkierunkowej z dostępnymi, dobrze udokumentowanymi wynikami badań eksperymentalnych nad spalaniem pojedynczej cząstki pozostałości kokosa w powietrzu i w zmodyfikowanej atmosferze. Następnie przeprowadzono symulacje numeryczne procesu spalania pojedynczej cząstki pozostałości węglowej w warunkach zmodyfikowanej atmosfery. Do rozważań wprowadzono bezwymiarowy numer kryterium, którego odpowiedni zakres wartości określał obszary procesu spalania ograniczone odpowiednim procesem granicznym, tj. albo szybkość reakcji po powierzchniach, albo szybkość dyfuzji składników gazowych. Uzyskane wyniki numeryczne wykazały istnienie różnic w przebiegu procesu spalania dla nierównomolowych i równomolowych modeli dyfuzji przeciwkierunkowej zastosowanych do gazowych substratów utlenionych i zgazowanych cząstek pozostałości koksowych. Jednak zastosowanie nierównomolowego modelu dyfuzji przeciwkierunkowej do procesu spalania w warunkach zmodyfikowanej atmosfery w komorach spalania kotłów wymaga czasochłonnego rozwiązania numerycznego

sprzężonych równań nieliniowych opisujących strumienie dyfuzji substratów gazowych dla każdego kroku czasowego w każdej komórce obliczeniowej. W związku z tym do rozważań wprowadzono zmodyfikowany współczynnik przenikania masy, którego zastosowanie w modelu umożliwiło szybsze numeryczne rozwiązanie niesprzężonego problemu nieliniowego opisującego proces spalania pozostałości koksu. Przeprowadzone obliczenia weryfikacyjne wykazały, że zastosowanie zmodyfikowanego współczynnika przenikania masy prowadzi do uzyskania wyników numerycznych opisujących w wystarczająco dobrym przybliżeniu proces spalania pozostałości koksu z wykorzystaniem modelu nierównomolowej dyfuzji przeciwkierunkowej.

W rozdziale 5 przedstawiono model matematyczny oraz wyniki symulacji numerycznej procesu spalania pyłu węglowego w warunkach atmosfery konwencjonalnej i modyfikowanej. W modelu matematycznym uwzględniono najważniejsze procesy zachodzące podczas spalania pyłu węglowego, tj. ogrzewanie, odparowywanie wilgoci, odparowywanie i spalanie substancji lotnych oraz utlenianie i gazowanie pozostałości koksu. Omówiono również podstawy emisji związków azotu i związków siarki. Dla modelu spalania pozostałości koksu wprowadzono uogólniony model "single-film", zgodnie z którym składnik gazowy dyfundujący w kierunku powierzchni cząstki może jednocześnie uczestniczyć w kilku reakcjach powierzchniowych. Określono warunki procesu spalania, dla których szybkość spalania pozostałości koksu jest ograniczona szybkością reakcji powierzchniowych lub szybkością dyfuzji składników gazowych. Przedstawiono mechanizm hetero- i jednorodnego zapłonu i spalania cząstki węgla w zależności od szybkości nagrzewania i wielkości cząstki węgla. Do celów obliczeniowych zaproponowano mechanizm zapłonu i spalania cząstki węgla w zależności od jej wielkości i stopnia odgazowania. Przedstawiono podstawowe równania opisujące wymianę ciepła przez promieniowanie oraz omówiono niezbędne zmiany w modelu opisującym emisyjność ośrodka gazowego podczas spalania w atmosferze modyfikowanej. Wykorzystując przedstawiony model matematyczny, w kotle OP-650 Dolna Odra wykonano szereg symulacji numerycznych procesu spalania pyłu węglowego dla warunków spalania w powietrzu oraz dla warunków zmiennej i jednocześnie modyfikowanej atmosfery. Badania numeryczne pozwoliły na wyznaczenie odpowiedniej recyrkulacji spalin do pracy kotła w warunkach spalania tlenowego, dla których wymiana ciepła na parowniku i przegrzewaczu radiacyjnym odpowiadała pracy w warunkach konwencjonalnego procesu spalania w powietrzu. Dalsze badania numeryczne pracy kotła dla obciążenia zmiennego w warunkach atmosfery modyfikowanej wykazały prawidłowy przebieg procesu spalania zarówno w fazie gazowej, jak i w fazie pyłu węglowego. Uzyskano prawidłową charakterystykę pracy palników pyłowych i zapłonu mieszanki pyłowej. Przepływ spalin w komorze spalania został zrealizowany w postaci przepływu wirowego specyficznego dla pieców z palnikami narożnikowymi. Uzyskane wyniki pozwalają na doposażenie kotła do pracy w warunkach spalania tlenowego.

W rozdziale 6 przedstawiono eksperymentalną i numeryczną procedurę badania kinetyki utleniania i zgazowania pozostałości koksu. Badania eksperymentalne przeprowadzono w pionowym izotermicznym piecu kroplowym. Głównym elementem stanowiska badawczego była elektrycznie podgrzewana 6-metrowa pionowa rura wykonana z węgla krzemowego przeznaczona do pracy w temperaturach do 1600°C. Próbkę pozostałości koksu do badań kinetyki uzyskano w procesie odgazowywania dwóch rodzajów węgla kamiennego w temperaturze 1300°C z szybkością nagrzewania 10⁴ K/s odpowiednio w CO₂ i N₂ w celu zbadania kinetyki spalania tlenowego i konwencjonalnego spalania w powietrzu. Badania eksperymentalne przeprowadzono w atmosferze konwencjonalnej i modyfikowanej dla wybranych wartości stężenia tlenu i temperatur reaktora. Spalanie pozostałości koksu

wyznaczone na podstawie badań w zależności od czasu przebywania było podstawą do wyznaczenia stałych kinetycznych opisujących proces utleniania i gazyfikacji. Stałe kinetyczne wyznaczono w procedurze numerycznej minimalizacji różnicy pomiędzy wartościami wypalenia uzyskanymi z badań doświadczalnych a wypaleniem uzyskanym jako rozwiązanie numeryczne opracowanego modelu matematycznego procesu spalania, w którym stałe kinetyczne potraktowano jako parametry wpływające na przebieg utleniania i zgazowania pozostałości koksowej. Wyznaczone wartości stałych kinetycznych dla procesu utleniania i zgazowania zweryfikowano następnie za pomocą eksperymentu numerycznego odtwarzającego warunki badań eksperymentalnych. Symulacja numeryczna CFD warunków eksperymentalnych była ważnym końcowym etapem badań kinetycznych, w ramach którego sprawdzono jakość uzyskanych wyników modelowania CFD dla opracowanego modelu matematycznego z wykorzystaniem kinetyki reakcji wyznaczonej na podstawie wyników badań eksperymentalnych. Wyniki badań numerycznych wykazały, że wyznaczona kinetyka reakcji utleniania, hartowania i zgazowania oraz opracowany model procesu spalania pozostałości koksu dobrze oddają warunki rzeczywistego procesu spalania i nadają się do zastosowań w modelowaniu numerycznym procesu spalania pozostałości koksu w warunkach zmodyfikowanej atmosfery.

Rozdział 7 podsumowuje wyniki badań i przedstawia możliwości praktycznego wykorzystania uzyskanych wyników na etapie modernizacji istniejących lub budowy nowych instalacji energetycznych lub przemysłowych wykorzystujących zmodyfikowaną atmosferę do spalania lub innego wykorzystania zarówno paliw węglowodorowych (węgiel, biomasa), jak i paliw niekopalnych, które nie generują emisji CO₂ (wodór, amoniak).