

*Ю.В. Луценко, канд. техн. наук, доц., нач. каф., УГЗУ,
А.Я. Шаршанов, канд. физ.-мат. наук, доц., доц. каф., УГЗУ,
Е.А. Яровой, преподаватель, УГЗУ*

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОБРАЗОВАНИЯ ГОРЮЧИХ ГАЗОВ ПРИ ПОДЗЕМНОЙ ГАЗИФИКАЦИИ УГЛЯ

(представлено доктором хим. наук В.Д. Калугиным)

Рассматриваются горение и газификация угля в канале подземного газогенератора на той стадии, когда процесс можно приближенно считать установившимся. Размеры канала (площадь сечения, доли поверхности, занимаемые углем и породами) предполагаются известными и определяются процессами обрушения горного массива. Разработана математическая модель рассматриваемого процесса.

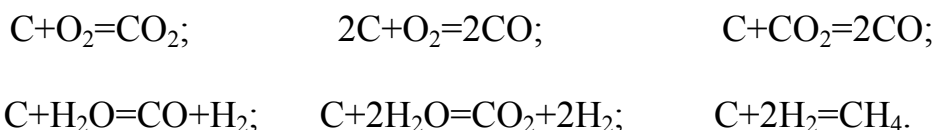
Постановка проблемы. В связи с относительным избытком запасов угля по сравнению с запасами горючих газов газификация угля приобретает большое хозяйственное значение. Данный процесс, имея дело с горючими веществами при высоких температурах, отличается высокой степенью технологической опасности. Это обстоятельство совместно со сложностью рассматриваемых процессов и серьезными проблемами их натурной реализации делает актуальной задачу математического моделирования.

Задача заключается в том, чтобы по составу дутья, его расходу, температуре и давлению на входе в канал определить изменение этих характеристик вдоль канала, в том числе на выходе из него.

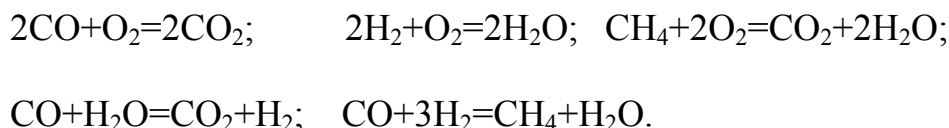
Анализ последних достижений и публикаций. Как свидетельствует анализ научно-технической литературы [1,2], рядом авторов предпринимались попытки разработать математические модели образования горючих газов при газификации твердых топлив. Однако вследствие влияния на процесс газообразования значительного количества технологических и природных факторов известные математические модели несовершенны и их уточнение требует проведения дополнительных теоретических и экспериментальных исследований.

Постановка задачи и ее решение. Математически процесс газификации описывается системой уравнений, включающих в себя уравнения сохранения вещества и энергии в газовой фазе, сохранения энергии в угольной стенке, движения газового потока, состояния идеального газа, а также уравнения химической реакции и их кинетические характеристики. Детальный перечень химических реакций, рассматриваемых при исследовании процессов подземной газифика-

ции углей, имеет следующий вид: реакции, происходящие на угольной стенке



и реакции, происходящие в газовой фазе:



В модели учитывается семь различных компонентов газовой смеси O_2 , CO_2 , CO , H_2O , H_2 , CH_4 , N_2 . Поток газа вдоль канала предполагается турбулентным. Считается также, что в сечении, перпендикулярном оси канала, газ достаточно хорошо перемешан: в ядре потока концентрации компонентов газовой смеси, температура, скорость потока и давление постоянны.

Обозначим переменную вдоль оси канала через x (м), площадь сечения S (м^2), длину контура, занимаемого углем l_y (м), и длину контура, занимаемого горными породами l_n (м). Уравнения сохранения вещества в предположении стационарности процесса имеют вид

$$\frac{d(w(x) \cdot c_i(x))}{dx} = \sum_i R_{ij} + \sum_m R'_{im} l_y / S + k_i l_y / S, \quad (i = 1, \dots, 7). \quad (1)$$

Здесь $w(x)$ -скорость потока вдоль оси канала (м/с); $c_i(x)$ -концентрация i -го компонента газа в сечении x (кмоль/ м^3); R_{ij} - скорость образования (поглощения) i -го вещества в j -й реакции в газовой фазе (кмоль/($\text{м}^3 \text{с}$)); R'_{im} - скорость образования (поглощения) i -го вещества в m -й реакции на поверхности угольной стенки (кмоль/($\text{м}^2 \text{с}$)); k_i -поток i -го газа пиролиза через угольную стенку или приток водяного пара в случае, когда индекс i соответствует H_2O (кмоль/($\text{м}^2 \text{с}$)).

Уравнение состояния идеального газа имеет вид

$$p(x) = \left(\sum_{i=1}^7 c_i(x) \right) \cdot RT_g(x), \quad (2)$$

где $p(x)$ -давление в сечении x (кПа); R -универсальная газовая постоянная (8,314 кДж/(кмоль К)); $T_g(x)$ -температура газа в ядре потока сечения x (К).

Связь скорости потока с давлением, учитывающая трение между газовым потоком и стенками канала, описывается уравнениями

$$w(x) \cdot \frac{d(\rho \cdot w)}{dx} = -1000 \frac{dp}{dx} - F_w, \quad (3)$$

где $\rho(x) = \sum_{i=1}^7 M_i c_i(x)$ – плотность газа в сечении x ; M_i – молекулярная

масса i -го вещества (кг/кмоль); $F_w = \frac{A}{d_{\text{eff}}} \cdot \frac{\rho \cdot w^2}{2}$ – удельная сила со-

противления движению единицы объема газа со стороны стенки канала (Па/м), где $d_{\text{eff}} = 4S/(l_y + l_n)$ – гидравлический эффективный диаметр сечения канала (м); A – безразмерный коэффициент сопротивления [3]. Он зависит от критерия Рейнольдса движения газа вдоль канала $Re = w \cdot d_{\text{eff}} / \nu$ (ν – коэффициент кинематической вязкости газа ($\text{м}^2/\text{с}$)) и параметра, учитывающего шероховатость поверхности стенок – h/d_{eff} (h – средняя высота шероховатости (м)).

$$A = \begin{cases} \frac{1.01}{(\lg Re)^{0.4}}, & Re < 11 \frac{d_{\text{eff}}}{h}; \\ \frac{0.343}{\left(\frac{d_{\text{eff}}}{h}\right)^{0.125} Re^{0.1}}, & 11 \frac{d_{\text{eff}}}{h} < Re < 445 \frac{d_{\text{eff}}}{h}; \\ \frac{1}{\left(1.14 + 2 \lg \frac{d_{\text{eff}}}{h}\right)^2}, & 445 \frac{d_{\text{eff}}}{h} < Re. \end{cases}$$

Уравнение энергетического баланса в канале газификации имеет вид

$$\frac{d\left(w \sum_{i=1}^7 c_i C_{pi} T_g\right)}{dx} = \sum_j q_j R_j + \alpha \cdot (T_y - T_g) \cdot l_y / S + \alpha \cdot (T_s - T_g) \cdot l_n / S + \\ + \sum_{i,m} R'_{im} C_{pi} \cdot T_y \cdot l_y / S + \sum_{i=1}^7 k_i C_{pi} \cdot T_y \cdot l_y / S + \text{rad}_g \cdot l_y / S. \quad (4)$$

Здесь C_{pi} -мольная изобарная теплоемкость i -го газа (кДж/(кмоль К)); q_j -тепловой эффект j -й реакции в газовой фазе (кДж/кмоль); R_j -скорость j -й реакции в газовой фазе (кмоль/(м³ с)); α -коэффициент конвективного теплообмена между газом и углем и газом и горными породами (кВт/(м² К)); T_y , T_s -температуры угля и инертной поверхности канала соответственно (К); rad_g -плотность потока лучистой энергии, получаемой (отдаваемой) от стенок канала (кВт/м²).

К выражениям (1)-(4) следует добавить уравнение теплового баланса в угле. Учитывая, что горение происходит в тонком слое угля, можно пренебречь кондуктивной передачей тепла в плоскости, касательной к поверхности угля. В результате уравнение энергетического баланса становится алгебраическим

$$\sum_m q'_m R'_m = \alpha \cdot (T_y - T_g) + \sum_{i,m} R'_{im} C_{pi} T_y + rad_y + W_*, \quad (5)$$

где q'_m - тепловой эффект m -й реакции на угольной стенке (кДж/кмоль); R'_m - скорость m -й реакции на угольной стенке (кмоль/(м² с)); rad_y учитывает лучистый теплообмен (кВт/м²); W_* -член учитывающий кондуктивную передачу тепла в направлении, перпендикулярном поверхности канала. Значение W_* определяется из решения автомодельной задачи.

В силу принятого условия стационарности, уравнение теплового баланса в породном массиве не рассматривается. В расчетах приближенно принимается $T_s(x)=T_g(x)$.

Естественными граничными условиями для (1)-(5) являются параметры дутья, подаваемого на вход в канал (в точке $x=0$), т.е значения $p(0)$, $v(0)$, $T_g(0)$, $c_i(0)$ ($i = 1, \dots, 7$). Выражения для теплоемкостей C_{pi} берутся с учетом их зависимостей от температуры. Величины тепловых эффектов реакций при температуре 298 К берутся из [4]. Зависимости тепловых эффектов реакций от температуры учитываются в соответствии с [5]

$$q(T) = q(T_0) + \sum' v_i \int_{T_0}^T C_{pi} dT - \sum^n v_i \int_{T_0}^T C_{pi} dT,$$

где v_i -стехиометрические коэффициенты реакции; $q(T)$ - тепловой эффект реакции при температуре T ; T_0 -температура, при которой те-

пловой эффект реакции задан (в нашем случае $T_0=298$ К);

\sum' - суммирование по участвующим в реакции веществам;

\sum'' - суммирование по веществам, получающимся в результате реакции.

Коэффициент конвективного теплообмена α рассчитывается в каждом сечении по формуле, отвечающей турбулентному течению в трубе [5]

$$\alpha = \lambda \cdot 0,022 Re^{0,8} Pr^{0,43} / d_{\text{eff}},$$

λ - теплопроводность газовой смеси (кВт/(м К)); Pr- критерий Прандтля.

Теплопроводности составляющих газовой смеси берутся зависящими от температуры в соответствии с [5]. Теплопроводность смеси вычисляется по формуле

$$\lambda = \left(\sum_{i=1}^7 y_i \lambda_i M_i^{1/3} \right) / \left(\sum_{i=1}^7 y_i M_i^{1/3} \right),$$

λ_i - теплопроводность компонент газа; y_i -объемная доля i -го газа в смеси.

Вычисления Re и $Pr = \left(\sum_{i=1}^7 C_{pi} c_i \right) \mu / (\rho \lambda)$ включают в себя рас-

четы величины динамической вязкости газа $\mu = \nu \cdot \rho$ (Па с). Вязкости компонентов газовой смеси вычисляются по формуле Сезерленда

$$\mu_i(T) = \mu_i(T_*) \cdot \frac{T_* + Z_i}{T + Z_i} \cdot \left(\frac{T}{T_*} \right)^{3/2},$$

где $\mu_i(T_*)$, $\mu_i(T)$ -динамические вязкости газа при температуре T_* и T соответственно; Z_i - константы Сезерленда. Значение Z_i и $\mu_i(T_*)$ при $T_* = 573$ К берутся из [6]

$$\mu = \left(\sum_{i=1}^7 y_i \mu_i M_i^{0,5} \right) / \left(\sum_{i=1}^7 y_i M_i^{0,5} \right).$$

Потоки лучистой энергии подсчитываются в соответствии с известными законами обмена лучистой энергией между потоком газа и стенками канала

$$\text{rad}_i = (\varepsilon_\omega + 1) \cdot 2,85 \cdot 10^{-3} (\varepsilon_g(T_y)(T_y/100)^4 - \varepsilon_g(T_g)(T_g/100)^4),$$

ε_ω - степень черноты стенки; $\varepsilon_g(T)$ - степень черноты газа при температуре T .

Излучательная способность газа приближенно представляется в виде $\varepsilon_g(T) = \varepsilon_{\text{CO}_2}(T) + \varepsilon_{\text{H}_2\text{O}}(T)$, где $\varepsilon_{\text{CO}_2}(T)$ - излучательная способность CO_2 , содержащегося в газе, а $\varepsilon_{\text{H}_2\text{O}}(T)$ - излучательная способность H_2O . Значения $\varepsilon_{\text{CO}_2}(T)$ и $\varepsilon_{\text{H}_2\text{O}}(T)$ подсчитываются по формулам, аппроксимирующим представленные в графической форме данные [7].

Аналогично для rad_y берется выражение

$$\text{rad}_y = (\varepsilon_\omega + 1) \cdot 2,85 \cdot 10^{-3} (\varepsilon_g(T_y)(T_y/100)^4 - \varepsilon_g(T_g)(T_g/100)^4) + k \cdot E,$$

где E - плотность потока лучистой энергии, выделяемой из угольной стенки и не поглощенной газом (кВт/м^2); k - некоторый безразмерный коэффициент, учитывающий долю этой энергии, уходящей на подогрев инертной поверхности канала. В расчетах обычно принимают

$$k = \begin{cases} 1_n / (1_n + 1_y), & T_y > T_g; \\ 0, & T_y < T_g. \end{cases}$$

Как отмечалось выше, величина W^* кондуктивно передаваемого тепла в направлении, перпендикулярном поверхности канала, определяется из решения автомодельной задачи о продвижении угольной стенки. Уравнение теплопроводности в угольной стенке в простейших предположениях имеет вид

$$\lambda_y \frac{\partial^2 T}{\partial n^2} = \rho_y C_y \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (6)$$

где n - расстояние, отсчитываемое по нормали к поверхности канала (м); λ_y, ρ_y, C_y - коэффициент теплопроводности, плотность и теплоемкость угля (для простоты эти величины предполагаются постоянными). Условие автомодельности означает, что

$$T(t, n) = T(n - u \cdot t), \quad (7)$$

где u - скорость продвижения угольной стенки (м/с). С учетом (7) уравнение (6) приобретает вид

$$\lambda_y T''(s) = -\rho_y C_y \cdot u \cdot T'(s). \quad (8)$$

Из (8) следует, что

$$T(s) = C_1 + C_2 \cdot \exp(-\rho_y C_y \cdot u \cdot s / \lambda_y). \quad (9)$$

Воспользовавшись условием, что на бесконечности температура угля становится равной температуре пород на данной глубине T_n , получим $T(\infty) = C_1 = T_n$. Поскольку на поверхности ($s=0$) $T=T_y$, из (9) следует, что $C_2 = T_y - T_n$. Таким образом,

$$T(s) = T_n + (T_y - T_n) \cdot \exp(-\rho_y C_y \cdot u \cdot s / \lambda_y), \quad (10)$$

откуда получаем, что

$$W_* = -\lambda_y dT(0) / ds = \rho_y C_y \cdot u \cdot (T_y - T_n).$$

Скорость продвижения угольной стенки рассчитывается в каждой точке по скорости потребления углерода на стенке в результате химической реакции $u = (\sum_j R'_{cj}) \cdot 12 / (\rho_y d_c)$, R'_{cj} - скорость потребления углерода в j -й реакции на угольной стенке (кмоль/(м²с)); d_c - доля углерода в сухом угле.

Величина C_y подсчитывается по формуле [8]

$$C_y = \begin{cases} 0,91116 + 0,001417T_y & \text{при } T_y < 598 \text{ К;} \\ 2,14618 - 0,0006483T_y & \text{при } T_y > 598 \text{ К.} \end{cases}$$

Скорости газофазных реакций берутся из литературы. Для реакции $2CO + O_2 = 2CO_2$, согласно [9],

$$-\frac{d[CO]}{dt} = 1,04 \cdot 10^{12} y_{O_2}^{0,25} y_{H_2O}^{0,5} T_g^{-2,5} \exp(-16105 / T_g) \text{ при } y_{O_2} > 0,05,$$

$$-\frac{d[\text{CO}]}{dt} = 9,84 \cdot 10^{12} y_{\text{CO}} y_{\text{O}_2} y_{\text{H}_2\text{O}}^{0,5} T_g^{-2,5} \exp(-16105/T_g) \text{ при } y_{\text{O}_2} < 0,05.$$

Здесь и ниже квадратные скобки обозначают молярную концентрацию соответствующих веществ (кмоль/м³), y с индексами, как и выше, соответствует объемной доле вещества в газовой смеси.

При реакции $2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$, согласно [10], принимается

$$-\frac{d[\text{H}_2]}{dt} = 1,08 \cdot 10^{13} [\text{O}_2][\text{H}_2] \exp(-15098/T_g).$$

Для скорости реакции $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 = \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$ используются следующие выражения: при температуре $T_g > 1200 \text{ K}$, согласно [9], принято

$$-\frac{d[\text{CH}_4]}{dt} = 7 \cdot 10^9 p T_g^{-1} y_{\text{CH}_4}^{-0,5} y_{\text{O}_2}^{1,5} \exp(-30196/T_g),$$

при $T_g < 1200 \text{ K}$ [12]

$$-\frac{d[\text{CH}_4]}{dt} = 0,407 \cdot 10^{13} p^{-1} [\text{CH}_4][\text{O}_2] \exp(-15700/T_g).$$

Скорость реакции $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} = \text{CO}_2 + \text{H}_2$ берется из [11]

$$-\frac{d[\text{CO}]}{dt} = 575RT_g \cdot ([\text{CO}] - [\text{CO}]_{\text{eq}}) \cdot (0,5 - p \cdot 10^{-4} / 253) \exp(-13971/T_g).$$

Скорость реакции $\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} = \text{CO} + 3\text{H}_2$ согласно [11] равна

$$-\frac{d[\text{CH}_4]}{dt} = 312 [\text{CH}_4] \exp(-15098/T_g).$$

Скорости гетерогенных реакций записаны в виде, принятом в работе [12]. При реагировании i -го вещества с углеродом

$$R'_m = \frac{dG_i}{dt} = A_m(T_y)(c_i - c_{\text{ieq}}),$$

где dG_i / dt - количество i -го газа, потребляемого на угольной стенке площадью 1 м^2 в m -й реакции; c_{ieq} - равновесная для данной реакции

концентрация i -го газа (кмоль/м³); $A_m(T_y)$ -приведенная константа скорости реакции (м/с).

Величина $A_m(T_y)$ вычисляется по формуле [13]

$$\frac{1}{A_m(T_y)} = \frac{1}{\beta_i} + \frac{1}{\omega_m},$$

β_i -коэффициент массоотдачи для i -го газа; ω_m - константа скорости химической реакции.

Величины β_i подсчитываются по формуле $\beta_i = Sh \cdot D_i / d_{eff}$, Sh -число Шервуда; D_i - коэффициент молекулярной диффузии i -го газа (м²/с). Число Шервуда вычисляется по формуле [14], соответствующей турбулентному потоку газа в трубе $Sh = 0,023 Re^{0,8} Sc^{1/3}$. Здесь $Sc = \nu / D_i$ - число Шмидта.

Коэффициенты молекулярной диффузии для i -го вещества D_i подсчитывается по формуле [8]

$$D_i = (1 - y_i) / \sum_{j \neq i} y_j / D_{ij},$$

где D_{ij} - коэффициенты молекулярной диффузии для бинарной смеси. Согласно [6]

$$D_{ij} = \frac{10^{-5} T^{1,75} [1/M_i + 1/M_j]^{1/2}}{\rho \cdot [(V_i)^{1/3} + (V_j)^{1/3}]^2},$$

V_i -диффузионные объемы. Их значения для рассматриваемых здесь газов приведены в [6].

Для скоростей гетерогенных реакций в соответствии с [3] принимаются значения, отвечающие реакциям газов с каменным углем: 1) $C + O_2 = CO_2$, 2) $2C + O_2 = 2CO$, 3) $C + CO_2 = 2CO$, 4) $C + H_2O = CO + H_2$. Согласно [14], имеем $\omega_m(T_y) = k_m \exp(-E_m / RT_y)$, $\lg k_m = 0,2 \cdot 10^{-4} E_m + 2$, $E_1 = 125000$ кДж/кмоль, $E_2/E_1 = 1,1$, $E_3/E_1 = 2,2$, $E_4/E_1 = 1,6$.

Реакция $CO + 2H_2O = CO_2 + 2H_2$ опущена, т.е в принятых предположениях она осуществляется в два этапа: сперва $C + H_2O = CO + H_2$ и затем конверсия окиси углерода водяным паром. Для реакции $C + 2H_2 = CH_4$ принято, что при средних давлениях константа скорости, согласно [11], в 1500 раз ниже константы скорости реакции

$C+O_2=CO_2$. Выражения для равновесных концентраций газов в различных реакциях берутся из [5].

Поскольку в сухом угле имеются полости и трещины, реакционная поверхность в гетерогенных реакциях отличается от заданной угольной поверхности. Это учтено в модели введением коэффициента увеличения площади. В расчетах этот коэффициент предполагается варьировать от 1 до 30.

Представленные в статье уравнения отвечают случаю канала постоянного сечения, однако разрабатываемая программа позволит рассчитывать каналы переменного сечения с различными соотношениями инертной и угольной поверхностей вдоль канала. Такой канал разбивает на последовательность каналов с постоянными сечениями, а при переходе от одного к другому необходимо только пересчитать скорость газового потока.

В предлагаемой модели процесс пиролиза не рассматривается подробно, а просто принято, что количество газа пиролиза составляет некоторую долю от количества прореагировавшего с газом угля, т.е. определяется скоростью продвижения угольной стенки.

Выводы. Представленная здесь модель хорошо соответствует имеющимся представлениям в процессах ПГУ, что указывает на возможность успешного использования её для анализа и прогнозирования этих процессов в условиях действующих и проектируемых газогенераторов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Е.В.Крейнин, Е.И.Шифрин Математическая модель процессов горения и газификации угля в канале подземного газогенератора//ФГВ. 1993, №5 С. 21-28
2. Шаршанов А.Я., Луценко Ю.В., Олейник В.В., Шульга И.В. Математическая модель процесса газификации углей в газогенераторах // УглеХимический журнал. 2001, № 3-4 С.33-40
3. Основы практической теории горения /Под ред. В.В.Померанцева. Л.:Энергоатомиздат. Ленингр. отд., 1986.-310с.
4. Дикерсон Р., Грей Г., Хейт Дж. Основные законы химии.- М.:Мир, 1982.-Т.2.-620с.
5. Бесков С.Д. Технохимические расчеты.- М.:Высш.шк.,1966.-520с.
6. Рид Р., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей.- Л.: Химия, 1971.-704с.
7. Юдаев Б.Н. Техническая динамика. Теплопередача.- М.:Высш.шк., 1988.-480с.

-
8. Jonson J.L. Kinetics of coal gasification.- N.Y.: John Wiley&Sons, 1979.
 9. Щетинков Е.С. Физика горения газов.- М.:Наука, 1965.- 740с.
 10. Peters N. Premixed burning in diffusion flames – the flame zone model of Libby and Economs// Int.J. Heat Mass Transfer/- 1979.-22, N5- P.691-703
 11. Govind R., Shah J. Modeling and simulation of an entrained flow coal gasifier// AIChE J.- 1984.- 30, N1.-P. 79-92.
 12. Dinsmoor B., Galland J.M., Edgar T.F. The modeling of cavity formation during underground coal gasification// J. Petroleum Technology, 1978, May. – P. 695-704.
 13. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. –М.: Наука, 1967.-491с.
 14. Беннет К.О., Майерс Дж.Е. Гидродинамика, теплообмен и массообмен.-Л.: Энергоатомиздат. Ленингр.отд-ние, 1986.-310с.

Стаття надійшла до редакції 10.09.2008 р.