

662
В676

Волков Э.П., Герасимов Г.Я.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Москва
2021



Волков Э.П., Герасимов Г.Я.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ



Москва
2021

УДК 536.7; 662.7; 66-6
ББК 24.53
В67

Волков Э.П., Герасимов Г.Я. **Моделирование энерготехнологических процессов.** – М., РАН, 2021. – 226 с., 98 илл.

554343



СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
ПРЕДИСЛОВИЕ	7
Глава I. ЭНЕРГОТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ УСТАНОВКИ	9
1.1. Классификация энерготехнологических установок	9
1.2. Парогазовые установки с внутрицикловой газификацией угля	11
1.3. Установки с пиролизом низкосортных твердых топлив	14
1.4. Концепция экологически чистой угольной ТЭС	18
1.5. Концепция IGCC	20
1.6. Подземная газификация твердого топлива	21
Глава II. СТРУКТУРА ОРГАНИЧЕСКОЙ МАССЫ ТОПЛИВА И ЕЕ ТЕРМОДЕСТРУКЦИЯ	30
2.1. Стадии метаморфизма угля	31
2.2. Классификация типов керогена	36
2.3. Строение органической массы угля	42
2.4. Структурные модели керогена сланцев	47
2.5. Разрушение макромолекулы угля при нагреве	54
2.6. Термическое разложение керогена сланцев	57
2.7. Вторичные химические реакции	60
2.8. Разложение сланцевого масла	65
2.9. Газификация твердого топлива	68
Глава III. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ	80
3.1. Уравнения химической термодинамики	80
3.2. Программный комплекс «ТЕТРАН»	84
3.3. Термодинамический анализ системы топливо-окислитель	86
3.4. Термодинамический расчет основных узлов установки УТТ	93
Глава IV. КИНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА	103
4.1. Простейшие кинетические модели пиролиза	104
4.2. Модель функциональных групп	110
4.3. Диффузионно-кинетическая модель	124
4.4. Газификация коксового остатка	132
4.5. Пиролиз крупных угольных частиц	137
4.6. Модель газификации углеродной частицы	143

Глава V. ГИДРОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СРЕДЫ	159
5.1. Движущийся слой	160
5.2. Кипящий слой	167
5.3. Спутный поток	182
5.4. Турбулентный газодисперсный поток	188
Глава VI. МОДЕЛЬ РЕАКТОРА-ПИРОЛИЗЕРА БАРАБАННОГО ТИПА	208
6.1. Движение сыпучего материала в реакторе	209
6.2. Теплообмен между частицами топлива и теплоносителя	211
6.3. Термическое разложение керогена и выход сланцевого масла	213
6.4. Результаты численного моделирования	217

ВВЕДЕНИЕ

Использование твердого топлива в мировом энергетическом балансе требует разработки различных методов его применения, основной целью которых является минимизация воздействия на окружающую среду при одновременном увеличении эффективности его использования. Важное место среди таких подходов занимает энерготехнологическая переработка твердого топлива, которая позволяет использовать для работы на твердом топливе современные высокоэкономичные энергетические установки, разработанные для экологически чистых топлив (ГТУ и ПГУ).

Под энерготехнологической переработкой твердого топлива понимается его химическая и термохимическая обработка с целью получения высококачественных топлив: твердого, жидкого и газообразного. Методы такой переработки классифицируются по характеру среды, в которой топливо подвергается деструкции (разложению): нейтральная или восстановительная среда (пиролиз топлива), окислительная среда (газификация топлива) и среда водорода (гидрогенизация). По тепловым условиям, при которых протекает процесс деструкции, его можно классифицировать как низкотемпературный процесс (температуры до 400 °С), среднетемпературный процесс (400–700 °С) и высокотемпературный процесс (900 °С и выше).

К энерготехнологическим установкам относятся комплексы взаимосвязанных энергетических и технологических аппаратов, состоящие из энергоблока, блока термической переработки топлива, а также устройств разделения и очистки получаемых продуктов термической переработки. В таких установках наряду с чисто энергетическими процессами (полное сжигание топлива и преобразование тепла в работу) осуществляются также технологические процессы (пиролиз и газификация топлива). В качестве сырья для энерготехнологической переработки наиболее целесообразны твердые топлива с большим выходом летучих (бурые угли и сланцы).

Термическая переработка твердого топлива в технологических аппаратах (пиролизерах и газификаторах) представляет собой совокупность сложных физико-химических процессов. Наиболее действенным подходом к решению проблем, возникающих при исследовании этих процессов, является разработка прямых методов их численного моделирования. Практика показывает, что в тех случаях, когда используются хорошо апробированные математические модели и вычислительные алгоритмы, дополнительная информация, получаемая с помощью численного моделирования, не уступает по надежности экспериментальным данным и превосходит последние по своей исчерпывающей наглядности и полноте.

В книге изложены современные методы математического моделирования высокотемпературного преобразования твердого топлива в энерготехнологических установках, основанные на термодинамическом, кинетическом и гидродинамическом подходах к описанию исследуемых процессов. Проана-

лизированы достоинства и недостатки этих подходов, приведены примеры их применения. Большое внимание уделено построению кинетической модели процесса применительно к пиролизу и газификации угольных и сланцевых частиц. Рассмотрены основные гидродинамические модели среды, используемые при моделировании реальных установок (фиксированный слой, кипящий слой, спутный поток, турбулентное течение химически реагирующей газодисперсной смеси). Приведены результаты экспериментальных и теоретических исследований по пиролизу низкокалорийных твердых топлив на установках с твердым теплоносителем (УТТ), проведенных сотрудниками ЭНИНа им. Г. М. Кржижановского, которые легли в основу математической модели реактора-пиролизера барабанного типа.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Человечество уже давно научилось использовать твердое топливо для получения тепла и электроэнергии. Эффективность процессов преобразования энергии при разных способах использования твердого топлива различна. Это могут быть как процессы горения топлива, так и его изменения химическим путем с помощью растворителей или водорода, а также процессы его термического разложения с присутствием кислорода или воздуха (газификация) или без доступа кислорода (процессы пиролиза). В последнем случае возможно, кроме получения электроэнергии, производить альтернативную искусственную нефть (сланцевое или угольное масло) и высококалорийный газ.

Проблемы использования альтернативных источников для получения искусственной нефти, способных восполнить истощающиеся запасы натуральной, давно уже занимают умы ученых и специалистов. В последние годы, благодаря развитию инновационных технологий по высокоскоростному бурению вертикальных и горизонтальных скважин и использованию технологии гидроразрыва, удалось задействовать глубоко расположенные низкоконцентрированные запасы сланцевого газа и сланцевой нефти для их вовлечения в промышленное использование. Еще более крупные запасы нефтяного сырья сосредоточены в керогене сланца, потенциальные ресурсы которого позволяют производить общее количество альтернативной нефти (сланцевого масла) на порядок больше, чем потенциальные запасы обычной нефти. Технология получения сланцевого масла общеизвестна и базируется на различных методах нагрева дробленого сланца с помощью внешнего источника тепла без доступа кислорода (процесс пиролиза). В зависимости от типа теплоносителя (газовый или твердый) возможно осуществить процесс пиролиза сланца различного фракционного состава с различной термодинамической и экономической эффективностью преобразования твердого керогена в жидкие и газообразные продукты.

Для расчета процессов преобразования и затем расчета необходимого оборудования нужно знать и уметь определять различные свойства и параметры исходных и получаемых веществ с учетом закономерностей проходящих процессов. Такие знания составляют основу для расчетов практических величин, используемых при проектировании и изготовлении реального оборудования и энерготехнологических установок.

При исследовании физико-химических процессов в рабочих средах в различных технических устройствах широко используются методы их математического моделирования.

Анализ различных работ по моделированию процессов горения и пиролиза твердого топлива показывает, что эти работы можно разделить на три группы. К первой группе относятся работы, основанные на использовании законов термодинамики. Данный подход позволяет оценить принципиаль-

ную схему организации процесса, но не может учесть и отразить многие конструктивные и режимные параметры реальных установок.

Вторая группа работ основана на широко развитых кинетических моделях, замкнутых одномерными гидродинамическими уравнениями движения среды. Основным преимуществом данного подхода является использование простых численных схем и большого числа элементарных химических реакций. Однако привлечение этих моделей для расчета энерготехнологических установок затруднено невозможностью учета турбулентного характера течения и его пространственной структуры в реакторе-пиролизере энерготехнологической установки.

К третьей группе работ относятся работы, посвященные анализу турбулентных газодисперсных течений в двух-трехмерной постановке с использованием упрощенных кинетических схем, моделирующих химические реакции в системе. Данный подход позволяет получить пространственное распределение основных характеристик течения в реакторе (поля концентраций основных компонентов, скоростные и температурные профили и т.д.) и проследить поведение дисперсной фазы.

Нами использованы все три подхода к моделированию высокотемпературного преобразования твердого топлива в энерготехнологических установках и приведены основные модели химических реакторов, используемые при построении гидродинамической модели среды.

Надеемся, что разработанные нами математические модели, методы их использования и результаты помогут специалистам, занимающимся исследованиями и расчетами энерготехнологических установок, составить более полную картину работ в этой важной и актуальной в настоящее время области науки, а также ознакомиться с новыми инструментами научных исследований.

Предложения и замечания по изложенному материалу, которые авторы воспримут с благодарностью, следует направлять по адресу: г. Москва, Издательский дом «НАУКА».

Авторы