

UKD 622.333: 622.1: 550.8: 622.519.61/64

Symulacyjne badanie procesu *ex-situ* zgazowania węgla kamiennego wspomagane metodami CFD

Simulation of *ex-situ* gasification process of hard coal aided with CFD methods



Prof. dr hab. inż. Jan Wachowicz*)



Prof. dr hab. inż. Marian Jacek
Łączny*)



Dr inż. Sebastian Iwaszenko*)



Dr inż. Tomasz Janoszek*)



Mgr Magdalena Cempa-Balewicz*)

Treść: Zaprezentowano wyniki numerycznej symulacji procesu zgazowania węgla z zastosowaniem metod numerycznej mechaniki płynów CFD (z ang. *Computational Fluid Dynamics*) przy wykorzystaniu narzędzia informatycznego Ansys-Fluent. Badania modelowe zakładały prowadzenie procesu zgazowania masy węglowej przy udziale tlenu, jako czynnika zgazowującego, w stanie ustalonym, tj. między 30 a 48 godziną trwania eksperymentu. Symulacje numeryczne prowadzono z zamiarem identyfikacji rozkładu zmian szukanych składników gazu procesowego. Uzyskane wyniki rozwiązania numerycznego zestawiono z wynikami badań eksperymentalnych prowadzonych w rzeczywistym reaktorze *ex-situ*.

Abstract: This paper presents the results of numerical simulation of coal gasification process with the use of computational fluid dynamics (CFD) methods applying the Ansys-Fluent software. Modelling studies assumed the conduction of the coal gasification process with the presence of oxygen as a gasification agent, in a stationary state i.e. between 30 and 48 hour of the experiment. Numerical simulations were developed with the intention of identifying the changes of components of the process gas. The results of the numerical solution were compared with the results of experimental studies.

Słowa kluczowe:

zgazowanie węgla, numeryczna mechanika płynów, modelowanie, eksperyment

Keywords:

coal gasification, computational fluid dynamics (CFD), modelling, experiment

*) Główny Instytut Górnictwa, Katowice

1. Wprowadzenie

Węgiel kamienny pokrywa 25 % światowego zapotrzebowania na energię [9]. Niestety większość wykorzystywanych dotychczas technologii węglowych charakteryzuje się dużą uciążliwością dla środowiska, a w szczególności emisją CO₂ i innych gazów cieplarnianych. Dlatego szczególny nacisk kładziony jest ostatnio na rozwój Czystych Technologii Węglowych (CTW), pozwalających na wykorzystanie węgla kamiennego w przyjazny dla środowiska sposób. Podziemne zgazowanie węgla zaliczane jest do technologii pozwalających na ograniczenie wielu niedogodności związanych z energetycznym wykorzystaniem węgla. Technologia ta ma na celu przekształcenie węgla bezpośrednio w złożu, w palny gaz możliwy do wykorzystania w energetyce lub syntezie chemicznej (gaz syntezowy). Szeroko zakrojone badania dotyczące tego procesu prowadzone są również w GIG. Zgazowanie pozwala nie tylko ograniczyć ilość emitowanych gazów cieplarnianych, ale jest też w stanie stać się ważnym procesem przy wytwarzaniu paliwa alternatywnego, jakim jest wodór. Ponadto pozwala często na zagospodarowanie pokładów trudnodostępnych, których eksploatacja w sposób konwencjonalny byłaby trudna i ekonomicznie nieefektywna [4],[3].

Podziemne zgazowanie węgla jest procesem, w trakcie, którego zachodzi wiele złożonych procesów fizykochemicznych. Na przebieg procesu wpływ mają zarówno zjawiska zachodzące w skali mikroskopowej, w porowatej strukturze poddawanego zgazowaniu węgla, jak również w obszarze makroskopowym, związanym z kształtem i własnościami przestrzeni objętej procesem oraz jej otoczeniem [7, 18]. Badanie zachodzących zjawisk, opisanie ich zależnościami oraz rozpoznanie potencjalnych możliwości sterowania ma duże znaczenie praktyczne [5]. Istotny jest również rozwój teoretycznego opisu procesu zgazowania węgla i lepszego poznania jego etapów. Wśród wielu stosowanych metod badawczych, szczególnie istotne wydaje się zastosowanie modelowania oraz wykorzystanie możliwości formalnego opisu zachodzących przemian. Wykorzystanie symulacji powinno umożliwiać określanie (choćby zgrubne) uzyskiwanych w zadanych warunkach parametrów gazu syntezowego, prowadzenia badań zmierzających do poprawy stabilności i jakości jego składu, pozwolić na przetestowanie wpływu czynników zakłócających (np. napływ wody do przestrzeni reakcyjnej). W dłuższej perspektywie modelowanie powinno być pomocne przy optymalizacji procesu oraz wspierać prace projektowe związane z przygotowaniem instalacji podziemnego zgazowania węgla.

W GIG były i są nadal podejmowane badania mające na celu opracowania modelu procesu podziemnego zgazowania

węgla lub występujących w tym procesie zjawisk (np. pirolizy) [11]. Prace te w większości wykorzystywały gotowe kody komercyjne oraz stwarzane przez nie możliwości. W artykule przedstawiono próbę predykcji stężeń wybranych składników w gazie syntezowym uzyskiwanym na wyjściu z reaktora, symulującego w zmniejszonej skali przebieg podziemnego zgazowania węgla. W badaniach wykorzystano dane doświadczalne pochodzące z eksperymentu przeprowadzonego *ex-situ* [16], zwanego dalej eksperymentem referencyjnym, oraz model numeryczny opracowany z wykorzystaniem numerycznej mechaniki płynów (CFD). Wartości parametrów występujących w modelu uzyskano z badań własności węgla, przeprowadzonych podczas realizacji eksperymentu referencyjnego, uzupełniając je danymi literaturowymi. Celem pracy było sprawdzenie, na ile możliwa jest predykcja stężeń wybranych składników gazu syntezowego w czasie, w oparciu o model opracowany i skalibrowany dla wcześniej przeprowadzonych eksperymentów [14, 15].

W rozdziale 2 przedstawiono przebieg eksperymentu, z którego dane zostały wykorzystane do utworzenia modelu. W rozdziale 3 przedstawiono opracowany model natomiast w rozdziale 4 uzyskane wyniki symulacji. Analiza uzyskanych rezultatów oraz podsumowanie zawarte zostało w rozdziale 5.

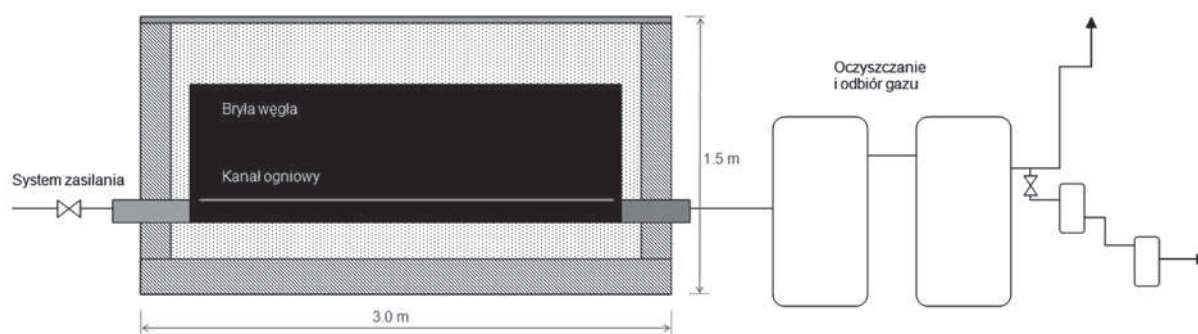
2. Badanie procesu zgazowania w warunkach *ex-situ*

Eksperyment referencyjny zgazowania węgla został przeprowadzony w naziemnym reaktorze zlokalizowanym w KD „Barbara”. Schemat stanowiska badawczego przedstawiono na rysunku 1 [16]. Badania prowadzono w reaktorze z kanałem w kształcie litery V (rys. 2) [16]. Jako czynnik zgazowujący zastosowano tlen (4-5 Nm³/h).

Bryła zgazowywanego węgla miała wymiary: 0.65 m (wysokość), 0.70 m (szerokość), 2.00 m (długość). Średnica kanału zgazowującego wynosiła 0.065 m a długość tworzącej walca 3.3 m.

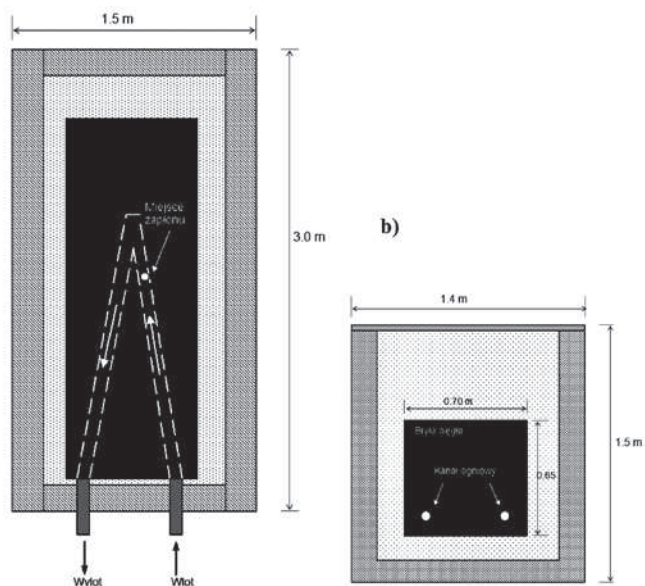
3. Model numeryczny CFD procesu zgazowania węgla

Warunki, w jakich przeprowadzono eksperyment opisany w rozdziale 2 zostały wykorzystane, jako podstawa sformułowania modelu procesu. Przyjęto, że tworzony model będzie wykorzystywał formalizm numerycznej mechaniki płynów. Przestrzeń obejmująca kanał zgazowujący oraz otaczającą go bryłę węgla została odwzorowana w modelu numerycznym. Obliczenia symulowały przebieg procesu zgazowania węgla kamiennego w stanie ustalonym, tj. między 30 a 48 godziną trwania eksperymentu.



Rys. 1. Schemat stanowiska badawczego *ex-situ* do prowadzenia procesu zgazowania węgla [16]

Fig. 1. Scheme of the *ex-situ* experimental installation for simulation of the coal gasification process [16]

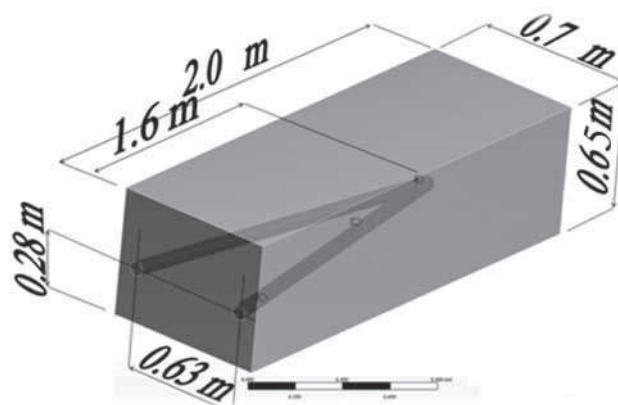


Rys. 2. Konfiguracja kanału ogniowego (a – przekrój poprzeczny, b – przekrój podłużny) [16]

Fig. 2. Configuration of a fire channel (a – cross section, b – longitudinal section) [16]

Do symulacji numerycznej została przyjęta następująca geometria (rys.3):

- model bryłowy warstwy węgla – 0,65 m × 0,70 m × 2,0 m,
- model bryłowy kanału zgazowującego o średnicy $\varnothing 0,065$ m.

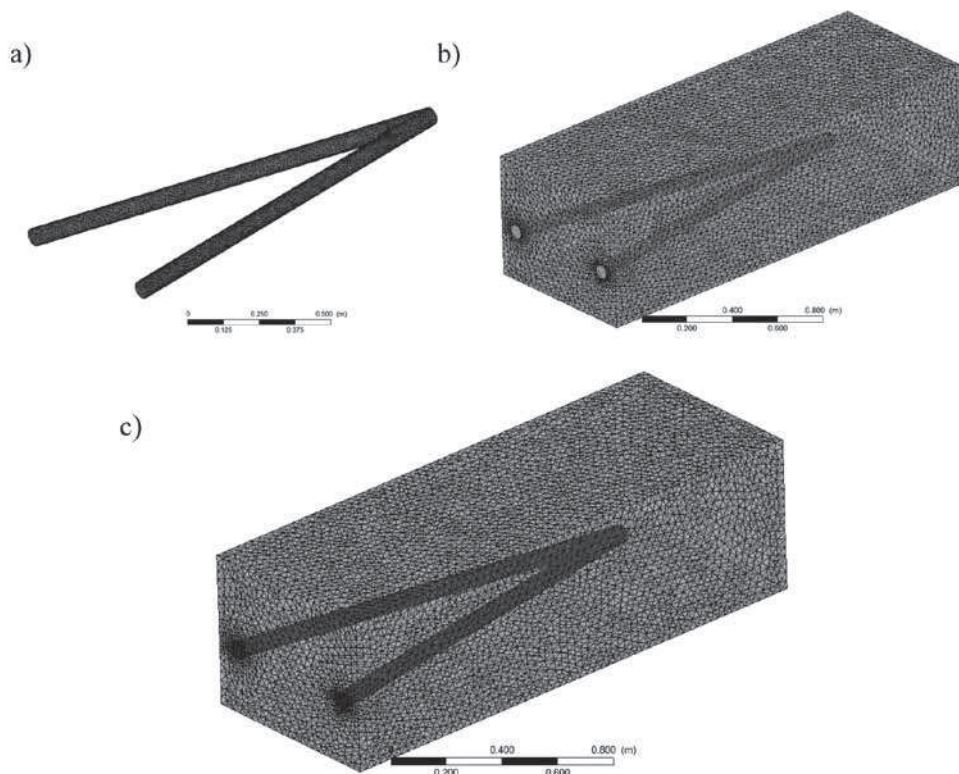


Rys. 3. Model geometryczny badanego układu reaktora *ex-situ*
Fig. 3. Geometric model of the *ex-situ* reactor

Rysunek 4 przedstawia wyniki obszaru dyskretyzacji rozwiązania numerycznego procesu PZW.

Obszar dyskretyzacji rozwiązania numerycznego modelowego układu georeaktora stanowi złożenie następujących siatek numerycznych:

- siatka numeryczna warstwy węgla utworzonej z 418 242 elementów prostych połączonych 76 576 punktami węzłowymi, stanowiącej odwzorowaniem masy węgla (rys. 4a),
- siatka numeryczna kanału zgazowującego, będącego odwzorowaniem strefy reakcji georeaktora, utworzonej z 76 589 elementów prostych połączonych wzajemnie ze sobą 16 738 punktami węzłowymi, jako odwzorowanie płynu (rys.4b).



Rys. 4. Obszar dyskretyzacji rozwiązania numerycznego: a) siatka numeryczna strefy reakcji zgazowania (kanał zgazowujący), b) siatka numeryczna masy węglowej, c) złożenie obszarów rozwiązania numerycznego

Fig. 4. Simulation grid of the *ex-situ* reactor: a – simulation grid of the gasification channel, b – simulation grid of the coal seam, c – assembly of simulation grid

Modelowanie procesu przenoszenia czynnika zgazowującego wzdłuż skończonej objętości geometrii kanału zgazowującego wymaga uzyskania rozwiązania równań różniczkowych opisujących zasadę zachowania masy, pędu i energii oraz równań transportu składników płynu wraz z reakcjami chemicznymi. Równania te omówiono w publikacji [14].

Burzliwy charakter procesu przenoszenia czynnika zgazowującego, wzdłuż kanału zgazowującego, opisano najczęściej stosowanym w praktyce CFD modelem turbulencji $k-\varepsilon$ [1]. Porowatość (1) i przepuszczalność (2) węgla są parametrami, które, w trakcie procesu PZW, ulegają zmianie w zależności od zmian temperatury otoczenia. Bazując na pracy [3], zależność opisującą zmienność parametrów efektywnych ośrodka porowatego, jakim jest węgiel, w funkcji zmian temperatury, zaimplementowano w następującej postaci:

– porowatość węgla [13], cytata za [3]

$$\phi = 0,2286 + 0,01041 \cdot T + 0,00001786 \cdot T^2 \quad (1)$$

gdzie:

T – temperatura, °C

– przepuszczalność węgla [12], cytata za [3]

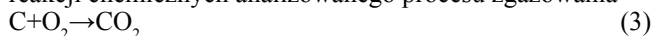
$$e = C_o \cdot \phi^3 / (1 - \phi)^2 \quad (2)$$

gdzie:

ϕ – porowatość, -

C_o – parametr eksperymentalny zależny od wielkości porów węgla ($C_o = 7.4e^{-12}$)

Chemizm procesu zgazowania zinterpretowano dwoma równaniami reakcji powierzchniowych pomiędzy masą węglową a czynnikami zgazowującymi i dwoma równaniami reakcji wtórnych, które wyrażono następującym schematem reakcji chemicznych analizowanego procesu zgazowania



Wartości parametrów równania kinetyki przyjętego schematu reakcji zgazowania wyrażonego zależnością [1]

$$k = AT^\beta e^{-E/RT} \quad (7)$$

zestawiono w tabli 1.

Tablica 1. Wartości parametrów równania kinetyki procesu zgazowania

Table 1. Parameter values of gasification kinetics model

Nr reakcji	E, J mol ⁻¹	A, s ⁻¹	β	źródło
(3)	3800	0.9740	0	[2]
(4)	1.15e ⁺⁰⁸	0.0782	0	[17]
(5)	8.38e ⁺⁰⁷	2.75e ⁺¹⁰	0	[17]
(6)	1.67e ⁺⁰⁸	2.5e ⁺¹⁶	0	[17]

Uwzględniono następujące lokalne warunki jednoznaczności rozwiązania numerycznego, osobno dla każdego z obszarów dyskretyzacji.

- Dla obszaru dyskretyzacji stanowiącego model kanału zgazowującego:
 - temperatura tlenu – 298.15 K,
 - strumień masy tlenu – $4 \div 5 \text{ N} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$,
 - ustalona temperatura wzdłuż kanału zgazowującego 923 K.
- Dla obszaru dyskretyzacji stanowiącego model warstwy węgla:
 - gęstość – $1450 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$,
 - porowatość – 5 % [3],
 - przepuszczalność β – $1e^{-15} \text{ m}^2$ [3],

- ciepło właściwe masy węglowej c_{pc} $1300 \text{ J} \cdot \text{kg} \cdot \text{K}^{-1}$ [6],
 - temperatura T – 298,15 K,
 - współczynnik przewodzenia ciepła – $0.535 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ [6].
- Rozpatrzono następujące ustawienia globalne (systemowe) w programie Ansys-Fluent:

- ciśnienie zgazowania – 101 325 Pa,
- przyspieszenie ziemskie – $9.81 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$,
- skala czasowa zjawiska – 18 godzin,
- zbieżność obliczeń – $1 \cdot 10^{-4}$.

Wykonując obliczenia przyjęto, że mają one odzwierciedlać sytuację, w której przebieg procesu ma być oparty o założenia dotyczące eksperymentu referencyjnego. Zadanie takie wydaje się typowe do zastosowania modelowania, jako narzędzia wspomagającego przygotowanie eksperymentu lub technologiczne zastosowanie procesu.

4. Wyniki badań

Na rysunku 5, 6, 7 zamieszczono wyniki zmian stężenia głównych składników w gazie procesowym uzyskane z badań modelowych. Wyniki te porównano w danymi eksperymentalnymi [16].

W tabeli 2 zestawiono średnie zawartości rozpatrywanych składników gazu procesowego otrzymane w drodze badań symulacyjnych i eksperymentalnych dla ustabilizowanego etapu pracy reaktora (tj. między 30÷48 godziną).

Tablica 2. Porównanie średnich stężeń głównych składników gazowych otrzymane z badań symulacyjnych (dane własne) i eksperymentalnych [16]

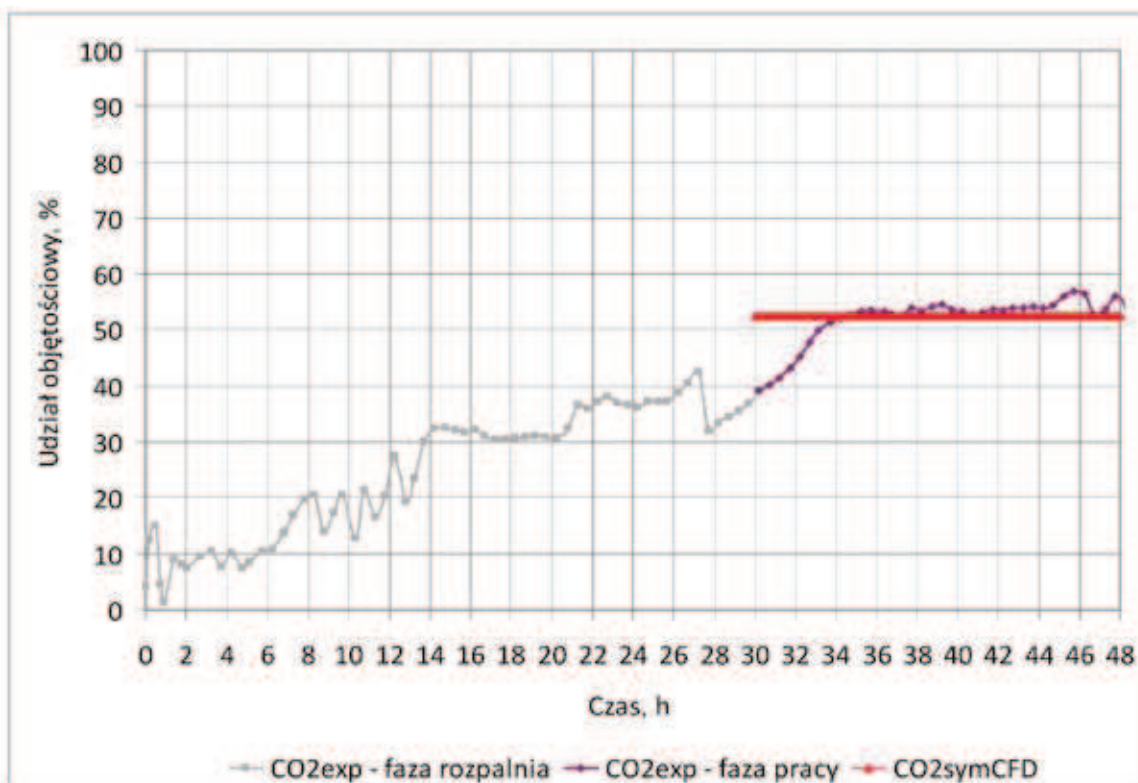
Table 2. Comparison of the average composition of main gas components obtained in the simulation (author's study) and experimental research [16]

dane	CO ₂ % obj.	H ₂ % obj.	CO % obj.
eksperymentalne	51.90	7.27	38.13
symulacyjne	52.42	6.54	41.03

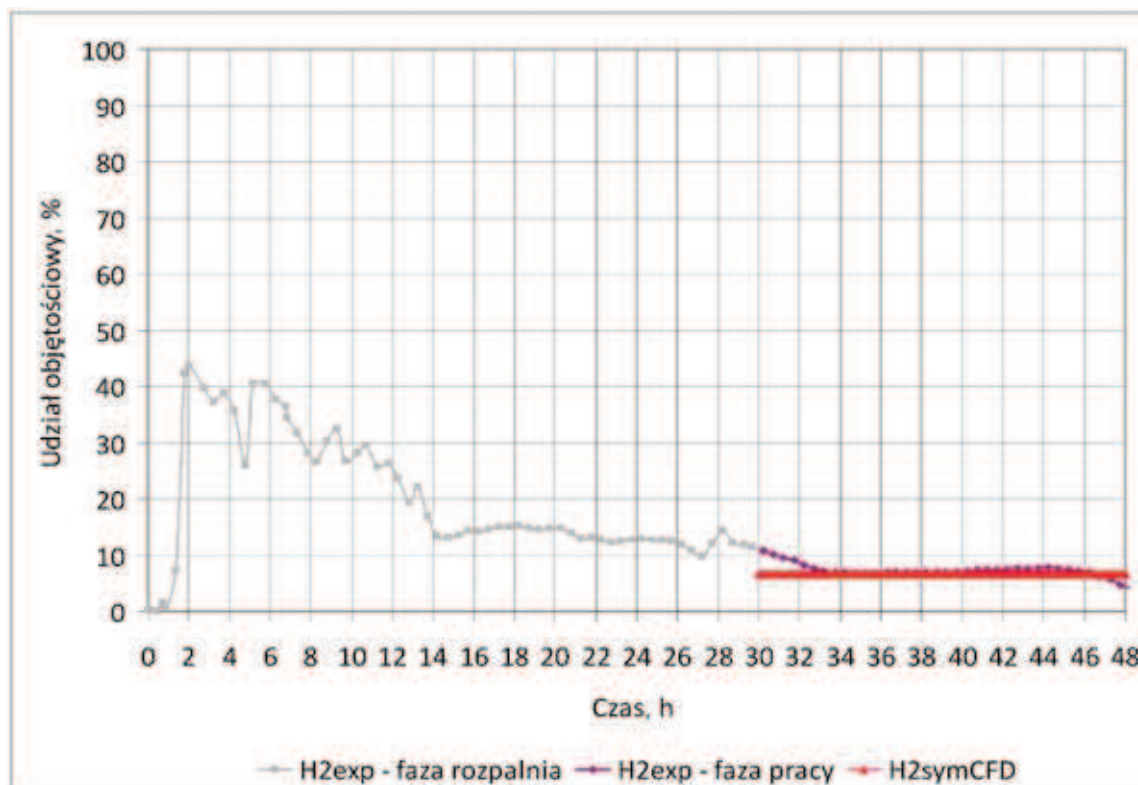
Zarówno analiza wykresów jak i porównanie wartości przedstawionych w tabelicy 2 wskazują, że uzyskane wyniki symulacji pozwoliły na satysfakcjonujące odtworzenie przebiegu eksperymentu dających dobrą zgodność modelu z danymi eksperymentalnymi. Skuteczność stosowania metod symulacyjnych potwierdzono również w źródłach literaturowych [10, 14, 15].

5. Podsumowanie

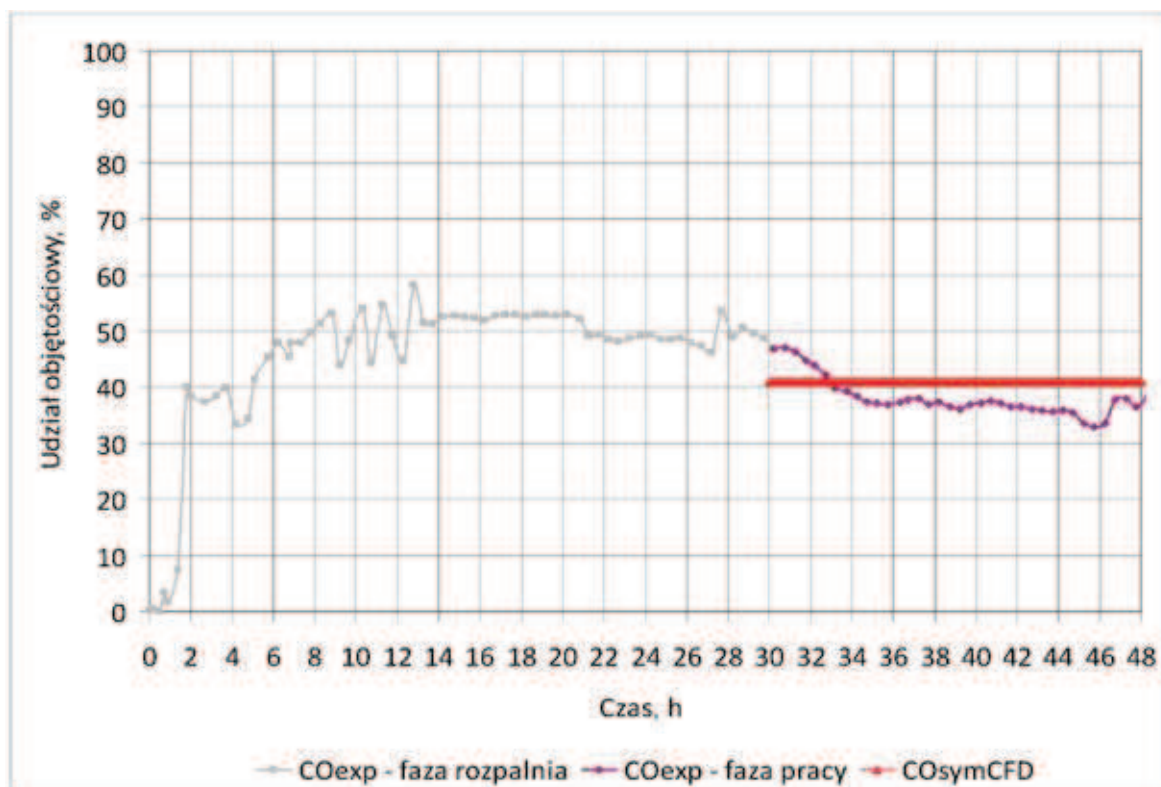
W pracy przedstawiono wyniki symulacji przeprowadzonej dla warunków eksperymentu podziemnego zgazowania węgla prowadzonego na stanowisku badawczym *ex situ*. Symulację procesu przeprowadzono opierając się na modelu opracowanym podczas wcześniejszych prac badawczych, dostosowany do warunków eksperymentu referencyjnego. Dostosowanie polegało na uwzględnieniu odpowiedniej geometrii oraz wartości parametrów. Rezultaty symulacji wykazywały zgodność wyników w stosunku do wartości zmierzonych podczas eksperymentu, pozwalając na predykcję przebiegu procesu w fazie ustabilizowanej pracy. Wskazuje to na użyteczność opracowanego modelu, jako narzędzia wspierającego prace związane z przygotowaniem eksperymentu oraz procesów technologicznych, a tym samym przydatne narzędzie badawcze w interpretacji wyników modelowania.



Rys. 5. Zmiana stężenia dwutlenku węgla w gazie w czasie trwania procesu zgazowania węgla
Fig. 5. Change in carbon dioxide concentration of gaseous product mixture during the coal gasification process



Rys. 6. Zmiana stężenia wodoru w czasie trwania procesu zgazowania węgla
Fig. 6. Change in hydrogen concentration of gaseous product mixture during the coal gasification process



Rys. 7. Zmiana stężenia tlenku węgla w czasie trwania procesu zgazowania węgla

Fig. 7. Change in carbon oxide concentration of gaseous product mixture during the coal gasification process

Oprócz modelowania numerycznego, również ważne jest właściwe wykorzystanie równowag, między innymi do oszacowania granicznego składu mieszaniny gazów, w danych warunkach temperatury i ciśnienia, co dodatkowo stanowi cenne uzupełnienie złożonych modeli numerycznych

Praca została wykonana w ramach Zadania Badawczego nr 3 pt. „Opracowanie technologii zgazowania węgla dla wysokoefektywnej produkcji paliw i energii elektrycznej” finansowanego przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju w ramach strategicznego programu badań naukowych i prac rozwojowych „Zaawansowane technologie pozyskiwania energii”.

Literatura

1. ANSYS FLUENT 12.0 Release Notes. ANSYS, Inc. 2009-03-02.
2. Askarova A.S., Karpenko E.I., Lavrichshev O.A., Messerle V.E., Ustimenko A.B.: Modelling of Plasma Supported Coal Combustion in Full-Scale Boiler. Termotekhnika 2009, XXXV, 2, 149,162.
3. Bialecka B.: Podziemne zgazowanie węgla. Podstawy procesu decyzyjnego. Katowice Wydawnictwo GIG 2008.
4. Bhutto A.W., Bazmi A.A., Zahedi G.: Underground coal gasification: From fundamentals to applications. Progress in Energy and Combustion Science 2013, 39, 189,214.
5. Bockelie M.J., Denison M.K., Chen Z., Senior C.L., Sarofim A.F.: Using Models To Select Operating Conditions for Gasifiers. Pittsburgh Coal Conference, September 15-19, 2003.
6. Chmura K.: Przewodność cieplna skał i węgla górnośląskiego karbonu. Praca habilitacyjna. Politechnika Śląska Zeszyty Naukowe nr 190, Gliwice 1968.
7. Collot A.: Matching gasification technologies to coal properties. International Journal of Coal Geology 2006, 65, 191,212.
8. Kardashew N. S.: Transmission of Information by Extraterrestrial Civilizations. Soviety Astronomy-AJ 1964, Vol. 8, No.2, 217,221.
9. Shafirovich E., Varma A.: Underground Coal Gasification: A Brief Review of Current Status. Ind. Eng. Chem. Res. 2009, 48, 7865,7875.
10. Nguyen T.D.B., Lim Y.-I., Song B.-H., Kim S.-M., Joo Y.-J., Ahn D.-H.: CFD Simulation of an Entrained-Flow Coal Gasifier for Coal IGCC Process. Proceedings of the Twentieth International Offshore and Polar Engineering Conference Beijing, China, June 20-25, 2010.
11. Rauk J.: Wybór optymalnych metod podziemnego zgazowania węgla. Praca GIG, seria dodatkowa, część I, Katowice 1977, część II, Katowice 1978.
12. Robeson L.M.: Polymer membranes for gas separation. Current Opinion in Solid State & Material Science 1999, Vol. 4, 549,552.
13. Seewald H., Klein J., Jungten H.: Pore structure of coal derived from permeation and sorption measurements. Proc. Int. Conf. On Coal Sci. Sydney, Pergamon Press 1985, s. 861.
14. Wachowicz J., Łączny M.J., Iwaszenko S., Janoszek T., Cempa-Balewicz M.: Zastosowanie pakietu FLUENT do symulacji procesu podziemnego zgazowania węgla – koncepcja metody. Przegląd Górniczy 2013, nr 2, 64,71.
15. Wachowicz J., Janoszek T., Iwaszenko S.: Model tests of the coal gasification process. Archiwum Górnicze 2010, Vol. 55. No. 2, 245,258.
16. Wiatowski M., Kapusta K., Stańczyk K.: Wpływ konfiguracji kanału ogniowego na skład i wydajność produktów podziemnego zgazowania węgla. Przegląd Górniczy 2013, 2, 80,90.
17. Vikram S.: CFD analysis of coal and heavy oil gasification for syngas production. PhD. thesis, Aalborg University 2012.
18. Żogała A., Kabiesz J., Iwaszenko S.: Czynniki wpływające na skład chemiczny i wartość opałową gazu uzyskiwanego w procesie podziemnego zgazowania węgla. Przegląd Górniczy 2013, 6, 89,95.



Zadanie Badawcze nr 3 pt.: „Opracowanie technologii zgazowania węgla dla wysokoefektywnej produkcji paliw i energii elektrycznej” finansowane przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju w ramach strategicznego programu badań naukowych i prac rozwojowych pt.: „Zaawansowane technologie pozyskiwania energii”.

