

Przemysław CIŻMIŃSKI¹
Sylwia POLESEK-KARCZEWSKA²
Dariusz KARDAŚ³
Bartosz MERTAS⁴

CIEPLNO-PRZEPŁYWOWY MODEL KARBONIZACJI SUCHEGO WĘGLA

Koksowanie węgla, istotne z technicznego punktu widzenia, jest procesem złożonym, na który składa się szereg zjawisk fizycznych i chemicznych. Kompleksowy model koksowania wymaga uwzględnienia zagadnień transportu ciepła, przemian fizykochemicznych i fazowych oraz zagadnień związanych z przepływem gazu. Podstawą procesu jest piroliza cząstki węgla, podczas której pod wpływem wysokiej temperatury ulega ona rozkładowi, w wyniku czego uwalniane są gazy pirolityczne. Termochemiczna konwersja cząstek węgla wiąże się jednocześnie ze zmianą ich struktury, tj. porowatości i gazoprzepuszczalności, co znacząco wpływa na dynamikę zmian ciśnienia w komorze koksowniczej. W pracy proponuje się jednowymiarowy nieustalony model procesu koksowania. Model opisuje proces karbonizacji węgla suchego i składa się z czterech równań bilansowych - bilansu masy fazy stałej, transportu masy fazy gazowej, bilansu pędu gazu, bilansu energii wsadu oraz, dodatkowo, równania stanu gazu doskonałego. Źródło masy gazów opisano bazując na danych termograwimetrycznych. Do rozwiązania zagadnień transportu ciepła i przepływu gazu wykorzystano schematy numeryczne częściowo niejawne. Model umożliwia predykcję rozkładu temperatury, ilości wydzielonych gazów, ciśnienia i prędkości gazów w komorze koksowniczej dla całego procesu rzeczywistego przy stosunkowo niewielkim koszcie obliczeń. Wyniki wskazują jednoznacznie na istotny wpływ zawartości części lotnych w węglu oraz gazoprzepuszczalności na zmianę ciśnienia w komorze.

Słowa kluczowe: koksowanie, piroliza, części lotne, gazoprzepuszczalność

¹ Autor do korespondencji/corresponding author: Przemysław Ciżmiński, Instytut Maszyn Przepływowych PAN, Fiszera 14, Gdańsk, 80-231, tel. 58 6995155, e-mail: pcizminski@imp.gda.pl

² Sylwia Polesek-Karczevska, adres: j.w., e-mail: sylwia@imp.gda.pl

³ Dariusz Kardaś, adres: j.w., e-mail: dk@imp.gda.pl

⁴ Bartosz Mertas, Instytut Chemicznej Przeróbki Węgla, Zamkowa 1, 41-803 Zabrze, e-mail: bmertas@ichpw.zabrze.pl

1. Wprowadzenie

Kompletny opis procesu karbonizacji węgla jest bardzo złożony, ze względu na szereg zachodzących procesów fizykochemicznych. Jednym z podstawowych zagadnień, składających się na matematyczny opis procesu jest transport ciepła. Zależy on głównie od ciepła właściwego materiału, jego gęstości i współczynnika przewodzenia ciepła. Zmienność tych parametrów w zależności od temperatury dodatkowo utrudnia opis zjawiska. Kolejnym zagadnieniem, które należy uwzględnić jest zmiana ciśnienia wewnątrz komory w trakcie procesu. Podczas ogrzewania wsadu węgla dochodzi do procesu pirolizy – termicznego rozkładu cząstek węgla. Wywiera ona wpływ na oba zjawiska – konsumuje energię niezbędną do przemiany fazowej oraz prowadzi do wydzielania się gazów pirolitycznych skutkującego zmianą ciśnienia w komorze. To drugie, ściśle wiąże się ze zmianą struktury węgla podczas procesu, a w szczególności jego porowatością i gazoprzepuszczalnością. Kiedy temperatura osiągnie ok. 450 °C we wsadzie powstaje jednorodna półpłynna warstwa tzw. warstwa metaplastu. Następnie metaplast ulega resolidyfikacji, w wyniku czego powstają spękania i szczeliny, stanowiące drogę ucieczki dla gazów. Metaplast charakteryzuje się znikomą, rzędu 10^{-13} m² gazoprzepuszczalnością [1]. Dla węgla i koksu ten parametr jest znacznie większy, co wynika z innej, bardziej porowatej struktury materiału.

Zaproponowany w niniejszej pracy model pozwala między innymi na obliczenia dynamiki zmian ciśnienia i temperatury w komorze dla całego procesu koksowania, czyli czasu rzędu 18 - 20 h przy kroku czasowym rzędu 10^{-3} s i dla komórki obliczeniowej rzędu 10^{-3} m. Obliczenia przeprowadzono dla węgla o stosunkowo dużej zawartości części lotnych, na poziomie 30%.

2. Model matematyczny

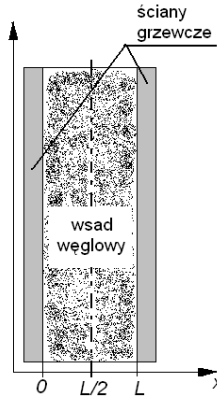
Rozważa się komorę koksowniczą o szerokości L , którą schematycznie przedstawiono na Rys. 1. Zakłada się, że transport ciepła i gazów zachodzi jedynie w kierunku x . Proponowany uproszczony jednowymiarowy model procesu karbonizacji składa się wówczas z następujących równań bilansowych:

- bilansu masy fazy stałej

$$\frac{\partial \varepsilon_s \rho_s}{\partial t} = -W_{sg}, \quad (1)$$

gdzie ε_s i ρ_s [kg/m³] oznaczają, odpowiednio, udział objętościowy i gęstość fazy stałej, zaś W_{sg} [kg/m³ s] jest członem reprezentującym ilość generowanych gazów pirolitycznych,

- bilansu masy fazy gazowej



Rys. 1. Schemat komory koksowniczej

Fig. 1. A scheme of coking chamber

$$\frac{\partial \varepsilon_g \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon_g \rho_g v_g}{\partial x} = W_{sg} \quad (2)$$

gdzie ε_g i ρ_g [kg/m³] to, odpowiednio, udział objętościowy i gęstość fazy gazowej, natomiast v_g [m/s] jest prędkością gazów,

- bilansu pędu fazy gazowej

$$\frac{\partial \varepsilon_g \rho_g v_g}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon_g \rho_g v_g^2}{\partial x} = -\frac{\partial p_g \varepsilon_g}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon_g \mu v_g}{K} + \varepsilon_g \mu \frac{\partial^2 v_g}{\partial x^2}, \quad (3)$$

gdzie p_g [Pa] jest ciśnieniem gazu, μ [kg/(m s)] jego lepkością dynamiczną, a K [m²] gazoprzepuszczalnością złoża, oraz

- bilansu energii złoża (wsadu)

$$\rho c_v \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \Delta T + W_{sg} h_{sg}, \quad (4)$$

gdzie T [K] oznacza temperaturę ρ [kg/m³] jest gęstością złoża, c_v [J/(kg K)] ciepłem właściwym, λ [W/m K] współczynnikiem przewodzenia ciepła, zaś h_{sg} [J/kg] odpowiada entalpii powstałych gazów.

Układ równań uzupełnia równanie stanu gazu doskonałego:

$$pV = nRT, \quad (5)$$

gdzie V [m³] oznacza objętość, n liczbę moli, $R=8.314$ [J/(mol K)] jest uniwersalną stałą gazową.

3. Obliczenia numeryczne

Z równania (1) aproksymowanego różnicami skończonymi, przy wykorzystaniu schematu jawnego, wyznacza się udział objętościowy fazy stałej

$$\varepsilon_{s,i}^{n+1} = \frac{\varepsilon_{s,i}^n \rho_{s,i}^n - W_{sg,i}^n \Delta t}{\rho_{s,i}^{n+1}}, \quad (6)$$

przy czym wartości źródła masy W_{sg} , reprezentujące ilość generowanych gazów podczas pirolizy, wyznacza się w każdej komórce dla każdej chwili czasu na podstawie aproksymacji eksperymentalnych danych termograwimetrycznych [2].

Zarówno równanie bilansu masy i pędu dla gazu (równania (2) i (3)), jak i równanie energii dla złoża (4) aproksymowano różnicami skończonymi przy zastosowaniu schematów częściowo niejawnych. Równanie energii można wówczas zapisać w formie równania macierzowego typu:

$$a_i T_{i-1}^{n+1} + b_i T_i^{n+1} + c_i T_{i+1}^{n+1} = d_i, \quad (7)$$

z trójkątniową macierzą współczynników a_i , b_i , c_i , d_i , które wyrażone są w postaci jawnej.

Stosując schemat częściowo niejawny do równania bilansu pędu gazów (3), wyznaczono wartości prędkości na brzegach komórek w kolejnych chwilach czasowych. Podstawiając je do różnicowej postaci równania (2), uzyskuje się macierzowe równanie na ciśnienie o postaci analogicznej do równania (7):

$$a_i p_{g,i-1}^{n+1} + b_i p_{g,i}^{n+1} + c_i p_{g,i+1}^{n+1} = d_i. \quad (8)$$

Do rozwiązania równań (7) i (8) wykorzystano metodę znaną jako algorytm Thomasa [3].

Do obliczeń przyjęto warunki symulujące pracę rzeczywistej komory koksowniczej. Założono temperaturę początkową $T(x,0)=T_0=300$ K. W rzeczywistości, komora grzana jest z obu stron (Rys. 1), zatem zagadnienie uznaje się za symetryczne. Wobec powyższego, do symulacji przyjmuje się zmienną w czasie temperaturę na ścianie komory, zakładając liniowy jej wzrost od temperatury początkowej T_0 do temperatury końcowej $T_k=1273$ K w ciągu 1 h oraz jej utrzymanie na tym poziomie do końca procesu, w osi natomiast przyjmuje się warunek symetrii (patrz Rys. 1):

$$T(0,t) = \begin{cases} T_0 + 0.27t & \text{dla } t \leq 3600 \text{ s} \\ T_k & \text{dla } t > 3600 \text{ s} \end{cases} \quad (9a)$$

$$\frac{\partial T(L/2,t)}{\partial t} = 0. \quad (9b)$$

Prędkość gazów na jednym z brzegów (lewym) wynosi 0 ze względu na istnienie nieprzepuszczalnej ściany, na drugim zaś (w osi komory) zakłada się swobodny odpływ gazów. Przyjęte warunki brzegowe można więc zapisać w następującej formie:

$$v(0, t) = 0, \quad \frac{\partial v(L/2, t)}{\partial x} = 0. \quad (10)$$

Założono ponadto, że na początku procesu ciśnienie we wsadzie jest równe ciśnieniu atmosferycznemu, $p(x, 0) = p_0 = 10^5$ Pa. Warunek na zmianę ciśnienia na ścianie komory wyznaczono w oparciu o równania (2) i (3) przy wykorzystaniu metody charakterystyk:

$$p(0, t) = p(0, t - \Delta t) + a \frac{p(\Delta x, t - \Delta t) - p(0, t - \Delta t)}{\frac{\Delta x}{\Delta t}}, \quad (11)$$

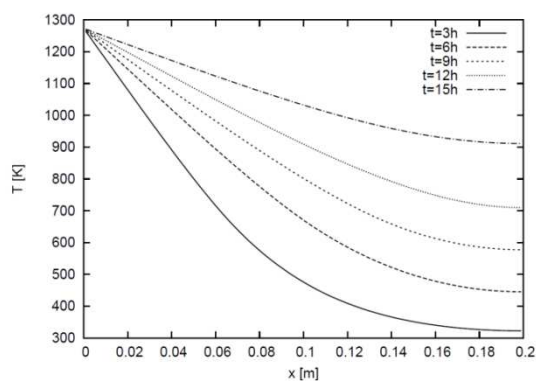
gdzie a jest prędkością sygnału $a = \sqrt{\frac{\partial p}{\partial \rho}}$. Przyjęto ponadto, że w osi komory ciśnienie pozostaje niezmiennie:

$$p(L/2, t) = p_0. \quad (12)$$

Własności termofizyczne węgla, tj. współczynnik przewodzenia i ciepło właściwe przyjęto w postaci funkcji temperatury, które zaczerpnięto z literatury, [4]. Gęstość wsadu węgla/koksu opisano funkcją temperatury $\rho = \rho(T)$, zamieszczoną w [5]. Dla gazoprzepuszczalności przyjęto zmienną funkcję temperatury, aproksymującą dane eksperymentalne z [1].

4. Wyniki

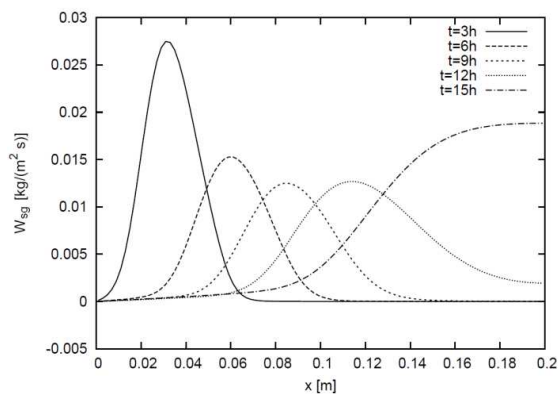
Obliczenia przeprowadzono dla komory o szerokości całkowitej $L = 0.4$ m oraz węgla o zawartości części lotnych na poziomie 30%. Początkowa porowatość wsadu wynosiła $\varepsilon_g = 0.45$. Na Rys. 2 przedstawiono rozkład temperatury wzdłuż połowy komory dla kolejnych chwil czasowych (co 3 godz.).



Rys. 2. Rozkład temperatury w złożu w kolejnych chwilach czasowych

Fig. 2. Time-sequential temperature distribution in coal bed

Najbardziej gwałtowny wzrost temperatury występuje na ścianie komory. Po upływie 15 godz. temperatura w osi osiąga 900 K.

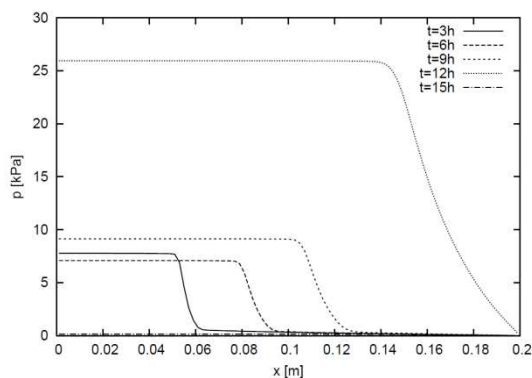


Rys. 3. Rozkład źródła masy w złożu w kolejnych chwilach czasowych

Fig. 3. Time-sequential mass source distribution in coal bed

Ilość wydzielanych gazów zależy w znacznym stopniu od temperatury. Wyniki obliczeń pokazane na Rys. 3, przedstawiające ilość gazów pirolitycznych powstających w komorze dla kilku chwil czasowych, wskazują na gwałtowne wydzielanie się gazów we wstępnej fazie procesu w pobliżu ściany komory, czyli w obszarze znacznego wzrostu temperatury. Ilość wydzielanych gazów maleje w ciągu 9 godz. do obszaru ok. 0.1m, po czym po upływie 12 godz. zaczyna wzrastać w dalszym obszarze w kierunku osi komory, gdzie panuje temperatura z zakresu powyżej 700 K, a zatem temperatury typowej dla intensywnej pirolizy węgla (porównaj Rys.2 i Rys. 3).

Rys.4 przedstawia pole ciśnienia w komorze dla kolejnych chwil czasu.

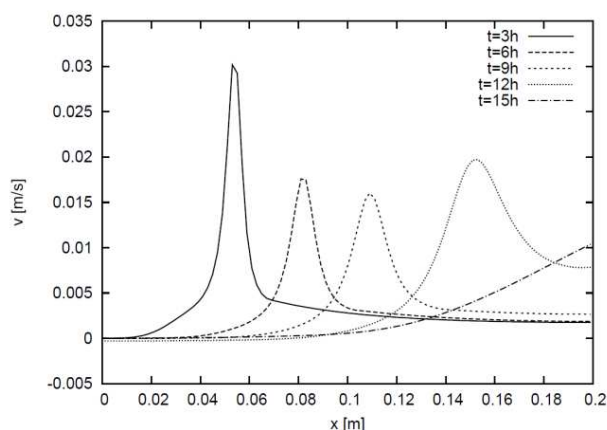


Rys. 4. Rozkład ciśnienia w złożu w kolejnych chwilach czasowych

Fig. 4. Time-sequential pressure distribution in coal bed

Zmiana ciśnienia ma charakter falowy. Zaobserwować można, że ciśnienie w złożu wzrasta w obszarze, gdzie generują się gazy. Wówczas, warstwa złoża w której zachodzi piroliza węgla (obszar o temperaturze powyżej 770 K) sąsiaduje z obszarem plastyczności węgla, tj. wsadem o temperaturze z zakresu ok. 700 – 770 K, charakteryzującym się bardzo niską gazoprzepuszczalnością, na poziomie 10^{-13} m^2 i blokującym przepływ gazu. Dla przykładu, wspomniana granica pomiędzy warstwami po upływie 3 godz. znajduje się w odległości ok. 0.05 m od ścianki, a po 12 h – w odległości ok. 0.15 m. W temperaturze wyższej niż 770 K węgiel staje się porowatą fazą stałą o znacząco większej przepuszczalności rzędu 10^{-10} m^2 , co pozwala na przepływ gazów, skutkując gwałtownym spadkiem ciśnienia do poziomu ciśnienia atmosferycznego (porównaj Rys.2 i Rys.4).

Rysunek 5 ilustrujący przewidywania modelu dotyczące prędkości gazów wewnątrz komory wskazuje na maksimum prędkości w obszarach, gdzie występują największe gradienty ciśnienia. W pobliżu ścianki komory gazy mają prędkość równą 0. Natomiast blisko osi komory, gdzie znajduje się wylot gazów, prędkość jest niezerowa. Odpowiada to ucieczce gazów pirolitycznych, które nie zostały zablokowane przez warstwę plastyczną o niskiej gazoprzepuszczalności. Wartość prędkości w osi komory rośnie z czasem, w miarę przyrostu masy wydzielonych gazów (patrz Rys. 3).



Rys. 5. Rozkład prędkości w złożu w kolejnych chwilach czasowych

Fig. 5. Time-sequential distribution of gas velocity in coal bed

5. Podsumowanie

Zaproponowany jednowymiarowy nieustalony model transportu ciepła i masy w złożu suchego węgla poddanego procesowi koksowania wskazał między innymi na silną zależność pomiędzy charakterystyką procesu transportu

ciepła, tj. dynamiką zmian ciśnienia i prędkości gazów w komorze a przyjętą gazoprzepuszczalnością. Jednocześnie, pozwala on na analizę zmian głównych parametrów procesu karbonizacji dla różnych typów węgla w zależności od zaimplementowanych danych termograwimetrycznych.

Literatura

- [1] Mertas B., Sobolewski A., Różycki G.: Badania gazoprzepuszczalności warstwy plastycznej węgla jako czynnika wpływającego na wielkość generowanego ciśnienia rozprężania, KARBO, 2 (2013) 163-171.
- [2] Polesek-Karczewska S.: Analiza porównawcza kinetyki zgazowania różnych rodzajów biomasy i paliw kopalnych. Oprac. wew. IMP PAN, nr arch. 141/08.
- [3] Lee W.T.: Tridiagonal matrices: Thomas algorithm, MS6021, Scientific Computation, University of Limerick
- [4] Polesek-Karczewska S. Kardaś D. Mertas B. Modelowanie rozkładu temperatury w piecu koksowniczym, KARBO, nr 3, 2009, s. 151-155.
- [5] Stelmach S., Kardaś D., Polesek-Karczewska S. Eksperymentalna weryfikacja nie-fourierowskiego modelu transportu ciepła w koksowanym wsadzie węglowym, KARBO, nr 3, 2011, s. 156-165.

THERMAL-FLOW MODEL FOR DRY COAL CARBONIZATION

Abstract

Coal coking, crucial from technical point of view, is a very complex process involving many physical and chemical phenomena. The complete model of coking requires taking into account of problems of heat transfer, physico-chemical and phase transitions, and gas flow. The basis of the process is the pyrolysis of coal particle, during which under high temperature they undergo decomposition, in result of which the pyrolytic gases are released. Thermochemical conversion of coal particles is associated with their structure change, e.g. their porosity and permeability, which strongly affects the dynamics of pressure change in coking chamber. In the paper, the transient one-dimensional model of coal coking is proposed. It describes the carbonization process of dry coal and consists of four balance equations- mass balance for solid, mass and momentum balance equations for gas, energy balance for coal charge, and additionally, the ideal gas law. Mass source for gas was described basing on thermogravimetric data. To solve the problems of heat transport and gas flow the semi-implicit numerical schemes were applied. The model enables to predict distributions of temperature, mass of released gases, pressure and gas velocity in coking chamber for the whole real process with relatively low calculation cost. The results clearly indicate on the effect of coal volatile content and gas permeability on the pressure change in the chamber.

Keywords: coking, pyrolysis, volatile content, gas permeability

DOI: 10.7862/rm.2014.34

Otrzymano/received: 25.05.2014

Zaakceptowano/accepted: 28.06.2014