

气流床粉煤气化性能模拟分析

宋志春, 鲍卫仁, 常丽萍, 李凡

(太原理工大学 煤科学与技术教育部和山西省重点实验室, 山西 太原 030024)

摘要:基于 Aspen Plus 工作平台, 运用 Gibbs 自由能最小化原理, 对气流床粉煤气化过程进行了数值模拟, 并对流程算法进行了改进。研究了氧煤比、蒸气煤比、压力及粉煤粒径对气化炉出口气体组成、温度、冷煤气效率、碳转化率及有效气产率的影响。结果表明: 模拟值和实验值有良好的相似性; 氧煤比对气化进程的影响较蒸汽煤比及其它操作条件更为显著; 并确定了模拟煤种的最佳氧煤比是 0.70 ~ 0.80 kg/kg, 气化炉出口 CO + H₂ 的最大干基体积分数为 96.48%, 冷煤气效率最高为 83.56%, 最大有效气产率为 1.74 m³/kg; 氧煤比每升高 0.1 kg/kg, 气化炉出口温度升高约 40 ℃, 而蒸汽煤比每升高 0.1 kg/kg, 气化炉出口温度降低约 8 ℃。

关键词: Aspen Plus; Gibbs 自由能; 平衡常数; 气流床; 粉煤气化

中图分类号: TQ54

文献标识码: A

文章编号: 1006-6772(2010)03-0039-05

煤炭气化技术是洁净煤技术的重要组成部分, 是煤炭转化的主要途径之一^[1]。发展基于煤气化的煤基能源及化工系统已成为能源领域科技界和企业界的共识, 也正在成为世界范围内高效、清洁、经济地开发和利用煤炭的热点技术和重要发展方向。

模拟气化过程具有十分重要的现实意义, 为工程放大、操作参数、理想工况大致确定等提供参考依据, 同时节省了大量的人力、物力及试验资金。模拟过程一般从稳态和动态 2 种过程考虑, 即热力学模型^[2]和动力学模型。动力学模型以气化系统的反应动力学为基础, 能真实反映炉内的气化过程, 但这种模型相对比较复杂, 通用性也较差。热力学模型以反应热力学为基础, 相对比较简单, 具有一定的通用性, 对碳转化率高、反应接近平衡的工况预测相对较好。张斌等^[3]建立了处理固体物流的气化炉平衡模型, 在煤裂解模块中考虑碳的不完全转化。代正华等^[4]用实际工业操作过程中的碳转化率数据和估算的热量损失修正模拟结果。吴学成等^[5]基于化学动力学并结合化学平衡建立

了气流床气化的数学模型。Ni^[6]建立了基于气流床煤气化平衡常数的一组非线性规划的方程组, 对于指导实践具有一定意义。Vamvuka 等^[7]从气流床反应器结构本身入手, 建立了微分数学模型, 考察了反应条件对气化结果的影响。笔者采用了最小 G 值法建立了粉煤气化模型, 借助过程流程模拟软件, 考虑到软件本身算法的有限选择性及不稳定性, 在前人研究的基础上, 重点在数值算法上做了改进和补充, 以保证计算能够快速、稳定的收敛。并对煤气化过程进行了三维热力学模拟计算, 为理想工况工艺参数的确定提供重要的理论依据。

1 最小 G 值法建模及模型描述

运用 Gibbs 自由能最小化方法建立的气流床煤气化炉模型如图 1 所示, 包含 5 个单元模块、11 个物流工艺流股和 2 个热流工艺流股。

1.1 煤干燥单元

为了防止煤粉粘结和堵塞反应器, 煤必须进行干燥, 使煤中水的质量分数小于 2%^[8]。此干燥单元利

收稿日期: 2010-02-02

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(20776092)

作者简介: 宋志春(1981—), 男, 内蒙古通辽人, 硕士研究生, 从事煤的优化转化研究。E-mail: smqh5207@126.com

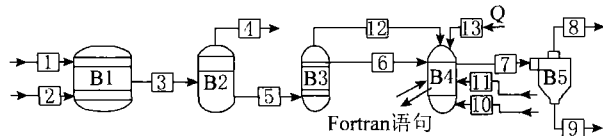


图1 气流床粉煤气化的计算流程

B1—干燥器;B2—闪蒸罐;B3—裂解器;B4—反应器;B5—分离器;
1—煤;2—氮气;3—混合物;4—废气;5—干煤;6—裂解物;7,8—粗
煤气;9—固体渣;10—氧气;11—水蒸气;12—裂解热;13—热损失

用 Rstoic 绝热反应器,在模块内部利用程序语句计算入炉煤的含水量。

1.2 煤裂解单元

煤裂解单元是一个仅计算收率的简单反应器,其主要功能是将粉煤分解转化成简单组分和灰,未转化碳归入灰组分,并假定该灰的组分性质稳定,不参与反应。同时将裂解热传递给 Gibbs 反应器单元。通过输入程序语句实现裂解组分 H_2O 、 N_2 、 O_2 、 S 、 H_2 、 C (固体)、灰的收率。此单元本身遵循质量守恒,只需考虑稳态情况下系统能量守恒。因气化过程是化学反应,气体和固体的焓均采用生成焓计算,即输入系统的焓与输出系统的焓相等,由盖斯定律可得具体表达式如下:

$$\sum_{i=1}^I m_i \Delta H_{f,i,298}^0 + \sum_{i=1}^I m_i \int_{298}^T C_{p,T,i} dT = \sum_{j=1}^J n_j \Delta H_{f,j,298}^0 + \sum_{j=1}^J n_j \int_{298}^T C_{p,T,j} dT + Q_p \quad (1)$$

煤的生成焓可采用如下表达式^[9]:

$$\Delta H_{f,coal,298}^0 = HHV - (327.86C_{ar} + 1418.79H_{ar} + 92.84S_{ar} + 158.67M_{ar}) \quad (2)$$

其中: Q_p 为粉煤裂解热, HHV 代表煤收到基高位发热量。

1.3 Gibbs 反应器单元

该单元是一个基于 Gibbs 自由能最小化原理的反应器。煤气化系统包含的组分为: H_2O 、 N_2 、 O_2 、 S 、 H_2 、 C (固体)、 CO 、 CO_2 、 H_2S 、 COS 、 CH_4 、 NH_3 、 HCN 。由于气流床粉煤气化本身温度高达 $1300^\circ C$ 以上,反应在瞬间完成,可认为体系达到化学反应平衡,通过建立一组非线性方程^[4]确定煤气中各组分的含量。

1.4 计算过程

遗传算法(GA)是一种基于生物自然选择与遗传机理的随机搜索算法,与传统搜索算法不同,它从一组随机产生的称为“种群(Population)”的初始解开始搜索过程。GA 以一种群体中的所有个体为对象,并利用随机化技术指导对一个被编码的参数

空间进行高效搜索。如图2所示。

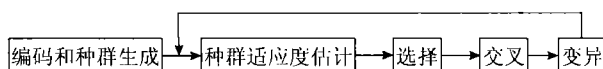


图2 GA 的计算过程流程

利用最小自由能方法的缺陷就在于无法有效估计 λ 值(拉格朗日乘子)的大概范围或近似值,因为牛顿-拉斐森方法对于迭代初值要求很高,要求给出的初值比较接近真实值,这在很多情况下无法做到,不确定整个方程组的迭代初值,为求解非线性方程组造成很大障碍,迭代次数多,收敛慢,使得误差增大。基于以上问题,在设计计算程序时,首先引入遗传算法得出最佳迭代初值,进而引入阻尼因子的麦夸特方法进行数值求解。

2 模型验证

气化用煤的元素分析和工业分析见表1,气化炉的进口参数见文献[8],模拟值、与试验值^[8]的比较见表2。从表中可以看出2种模拟方法的结果与试验结果基本吻合,说明该模型能够较为准确的模拟气流床气化炉的性能。

表1 煤样的工业分析和元素分析

M_{ad}	工业分析			元素分析					/%
	A_d	V_d	FC_d	C_{daf}	H_{daf}	N_{daf}	S_{daf}	O_{daf}	
7.30	10.37	36.54	45.79	81.37	5.33	1.36	4.11	7.83	

表2 气化模拟结果与试验结果比较

项目	气体产率							/%
	CO	H_2	CO_2	CH_4	H_2S	N_2	H_2O	
模拟值	62.72	30.27	1.39	0.04	1.12	2.71	1.56	
实验值	62.48	30.55	1.75	0.03	1.17	2.96	0.28	

3 模拟分析

3.1 流量对比对气化性能的影响分析

在煤气化过程中,氧煤比是控制气化炉气化过程反应操作的主要条件之一,耗氧量是煤气化过程中的主要经济指标。通常氧煤比中氧的理论用量应该是氧原子数与煤中的碳原子数相等,使煤中的碳全部转变为煤气中的 CO ,若氧的用量超过这一比值,则一部分碳将转变为无效成分 CO_2 。实际气化中,氧应包括煤中的氧及气化剂中带入的氧。氧煤比对气化过程会带来2方面的影响,一方面,氧煤比增加使燃烧反应放出的热量增加,从而提高了反应温度,有利于 CO_2 的还原和水蒸气分解反应的进行,

从而增加煤气中的有效成分,提高碳的转化率;另一方面,燃烧反应又直接生成 CO_2 和水蒸气,增加了煤气中的无用成分。因此其他条件一定时,必有 1 个最适宜的氧煤比,以得到较好的气化结果。当氧煤比一定时,蒸气煤比太小使气化温度过高,所需设备材料要求相应提高,成本增加;蒸气煤比太大使系统气化温度太低,不利于 CO_2 的还原和水蒸气的分解反应,使得煤气品质下降,碳转化率降低。

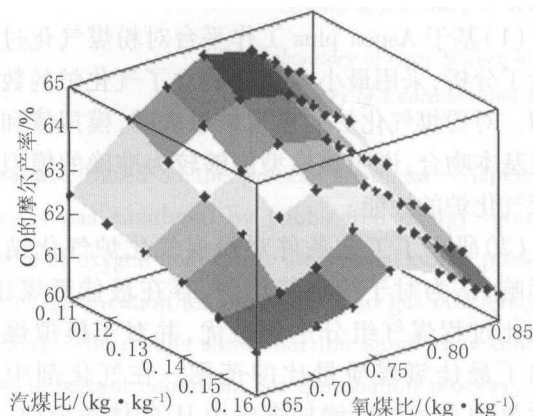


图3 流量对比对出口 CO 摩尔分率的影响

煤气中 CO 的变化趋势如图 3 所示,在氧煤比达到理论值前,煤气中 CO 呈上升趋势,氧煤比超过理论值后,煤气中的 CO 将转变成 CO_2 ,此时煤气中的 CO 含量呈下降趋势。同时可看到,随着蒸汽煤比的增加,煤气中 CO 含量呈下降趋势。这主要是在气化过程中蒸汽分压的增大,降低了炉内的温度,致使气化反应速率减慢,从而使 CO 的含量降低。如图 4 所示,在低氧煤比状态下,随着氧煤比的增加,半焦及气相燃烧反应加剧,使炉内温度迅速升高, $\text{C} + \text{H}_2\text{O} = \text{CO} + \text{H}_2$ 反应加快, H_2 的含量增加。当氧煤比达到某一定值时, H_2 分压达到极值,而后会使其与 O_2 的反应占优。另外可看到,在氧煤比一定时,蒸汽煤比增加,煤气中 H_2 的含量略有增加。主要是反应中温度的下降对半焦气化反应的影响较水煤气变换反应更为显著所致。

如图 5 所示,随着蒸汽煤比的增加,煤气中 CO_2 的含量增加,水煤气变换反应占优,在蒸汽煤比一定的条件下, CO_2 的含量随着氧煤比的增加而增加,说明燃烧反应起主导作用。如图 6 所示,氧气含量的增加加快了半焦燃烧以及气化反应的速度,提高了系统炉内反应的温度,反应加剧,相应地提高了

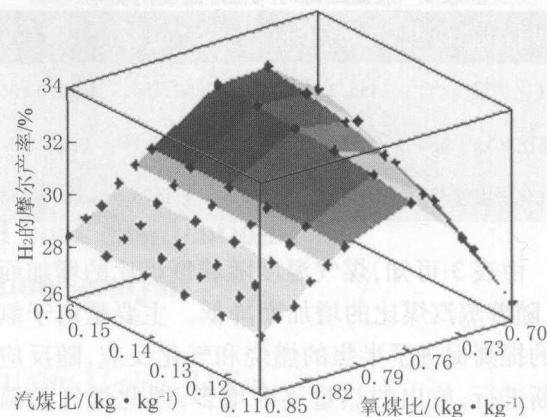


图4 流量对比对出口 H_2 摩尔分率的影响

碳转化率。水蒸气含量的增加,促进了半焦与水蒸气反应的速度,从而提高了碳转化率。因此,相对提高蒸汽煤比可以降低煤气化过程的氧耗量。从图中亦可看出氧煤比对碳转化率的影响远大于蒸汽煤比。这主要是受炉内温度所控制,由表 3 的分析可知,加入相同的氧气及蒸汽,温度的变化对于氧气的加入更为显著。

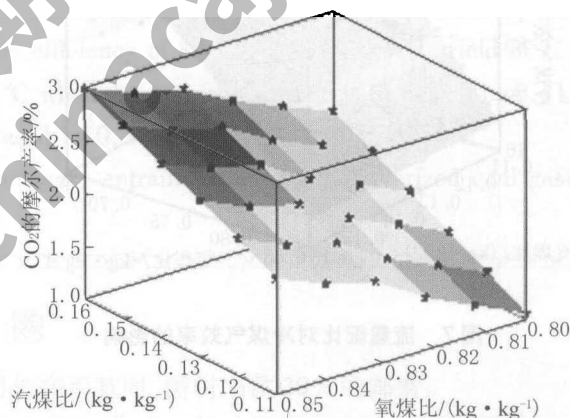


图5 流量对比对出口 CO_2 摩尔分率的影响

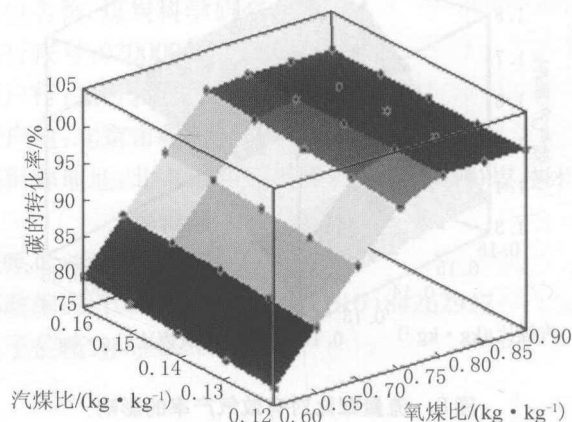


图6 流量对比对碳转化率的影响

表3 流量对比对气化炉温度的影响

氧煤比/($\text{kg} \cdot \text{kg}^{-1}$)	0.80	0.81	0.82	0.83	0.84	0.85
气化炉温度/ $^{\circ}\text{C}$	1458.2	1501.0	1542.5	1584.3	1626.0	1666.4
汽煤比/($\text{kg} \cdot \text{kg}^{-1}$)	0.11	0.12	0.13	0.14	0.15	0.16
气化炉温度/ $^{\circ}\text{C}$	1601.2	1593.1	1585.0	1576.9	1569.8	1562.0

由表3可知,煤气温度随着氧煤比的增加而增大,随着蒸汽煤比的增加而降低。主要是由于氧煤比的提高促进了半焦的燃烧和气化反应,随反应的不断进行,放出的热量逐渐增多,因此煤气的温度呈上升趋势。当蒸汽煤比增加时,半焦与蒸汽反应会吸收大量的热,使气化炉内的温度下降。氧煤比每升高0.1 kg/kg 时,炉内温度升高约40 $^{\circ}\text{C}$;蒸汽煤比升高0.1 kg/kg 时,炉内温度下降约8 $^{\circ}\text{C}$ 。

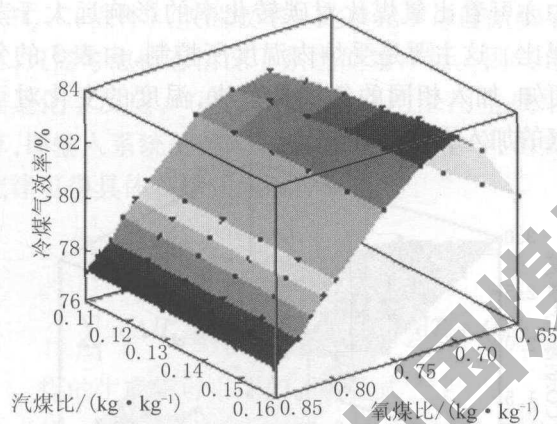


图7 流量对比对冷煤气效率的影响

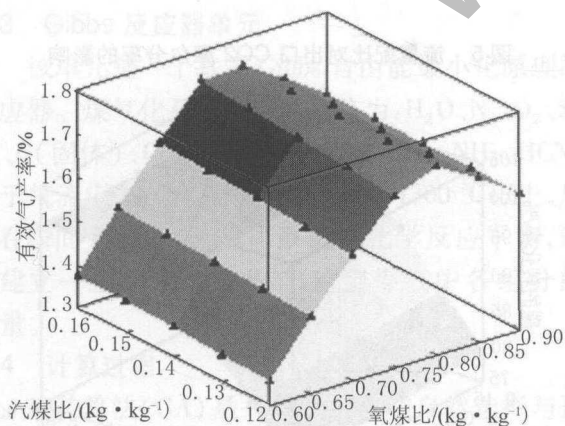


图8 流量对比对有效气产率的影响

如图7、图8所示,随着氧煤比增加,碳转化率提高,煤气的有效气产率增加,因而冷煤气效率提

高。当氧煤比达到一定值后,冷煤气效率达到最大值83.56%,有效气产率达到最大值1.74 m^3/kg 。而后过量的氧气促使半焦燃烧反应的速度增加,造成煤气中的无效成分 CO_2 和 H_2O 含量提高,冷煤气效率及有效气产率随之下降。在低氧煤比的条件下,提高蒸汽煤比亦可以提高冷煤气效率及有效气产率,在高氧煤比的条件下对二者则影响不大,这主要是受碳转化率所控制。

4 结 论

(1)基于Aspen plus工作平台对粉煤气化过程进行了分析,采用最小G值法建立了气化炉的数学模型。对粉煤气化炉的模拟结果表明,模拟值和试验值基本吻合,说明该模型能够较为准确的模拟气流床气化炉的性能。

(2)研究了工艺条件对粉煤气化炉气化结果的影响,认为对于给定气化炉,存在最佳氧煤比,使气化过程煤气组分达到最优,并对于模拟煤种给出了最佳氧煤质量比的范围。在气化剂中加入适量的水蒸气能增加煤气中 H_2 的体积分数,控制炉温不致过高,同时还能降低氧耗量(因 H_2O 中含有氧);但水蒸气过多将使炉温降低,影响气化过程。

参考文献:

- [1] 邱立新,雷仲敏,周田君. 洁净煤技术的评价方法研究[J]. 洁净煤技术,2006,11(1):5-8.
- [2] Kovacic G, Oguztoreli M, Chambers A, et al. Equilibrium calculations in coal gasification [J]. Hydrogen Energy, 1990,15(2):125-131.
- [3] 张斌,李政,江宁,等. 基于Aspen Plus建立喷流床气化炉模型[J]. 化工学报,2003,54(8):1179-1182.
- [4] 代正华,龚欣,王辅臣,等. 气流床煤气化的Gibbs自由能最小化模拟[J]. 燃料化学学报,2005,23(2):129-133.
- [5] 吴学成,王勤辉,骆仲泱,等. 气化参数影响气流床煤气化的模型研究(I)—模型建立及验证[J]. 浙江大学学报(工学版),2004,38(10):1361-1365.
- [6] Ni Q Z, Williams A. A simulation study on the performance of an entrained-flow coal gasifier[J]. Fuel,1995,74(1):102-110.
- [7] Despina Vamvuka, Edward T, Woodburn and Peter R. Senior. Modelling of an entrained flow coal gasifier. 1. Development of the model and general predictions[J]. Fuel,1995,74(1):

1452-1460.

[8] 许世森,张东亮,任永强. 大规模煤气化技术[M]. 北京:化学工业出版社,2008.

[9] LI X, GRACE J R, WATKINSON A P, et al. Equilibrium

modeling of gasification; A free energy minimization approach and its application to a circulating fluidized bed coal gasifier [J]. Fuel, 2001, 80: 195-207.

Entrained-flow pulverized coal gasification performance simulation analysis

SONG Zhi-chun, BAO Wei-ren, CHANG Li-ping, LI Fan

(Key Laboratory of Coal Science and Technology, Taiyuan University of Technology,
Ministry of Education and Shanxi Province, Taiyuan 030024, China)

Abstract: Based on the process simulator—Aspen Plus software, the entrained-flow pulverized coal gasification process was simulated by Gibbs free energy minimization method, the flow arithmetic was improved also. The effects of oxygen-coal ratio, steam-coal ratio, pressure and pulverized coal particle size on the crude syngas composition, gasification temperature, cold gas efficiency, carbon conversion efficiency and productivity of CO + H₂ were studied. The results show that the simulation and the experiment results fit well. Oxygen-coal ratio is one of the most important conditions for gasification process, which is more significant than the other conditions, and the best oxygen-coal ratio is 0.70~0.80 kg/kg for simulated coal. The best parameters corresponding gasification process are CO + H₂ volume fraction of 96.48% (dry base), cold gas efficiency of 83.56% and CO + H₂ yield of 1.74 m³/kg coal. The gasification temperature is elevated about 40 °C when the oxygen-coal ratio is increased by 0.1 kg/kg and reduced about 8 °C when the steam-coal ratio is increased by 0.1 kg/kg.

Key words: Aspen Plus; Gibbs free energy; equilibrium constant; entrained-flow bed; pulverized coal gasification

图书订购

书名	定价(元)
动力配煤	32.00
动力煤利用技术	44.00
煤矿环境监测	56.00
煤矿固体废物治理与利用	31.00
煤矿矿井水及废水处理利用技术	38.00
洁净煤技术与矿区大气污染防治	39.00
煤质管理与经营	40.00
煤炭化验结果的审核与计算	38.00
中国动力煤资源及利用	35.00
中国无烟煤利用技术	35.00
中国炼焦煤的资源与利用	48.00
中国煤的的洁净利用	58.00
矿井惰性气体防灭火技术	38.00

另外在汇款时,需付书款 20% 的邮费。

订购方法: 邮局汇款按编辑部地址汇款即可;

银行信汇方式如下:

单位名称: 煤炭科学研究总院

银行帐号: 0200004209089115910

开户行: 工行和平里支行营业室

开户地: 北京市朝阳区

编辑部地址: 北京市和平里煤科院内《洁净煤技术》

编辑部

联系人: 宫在芹

邮政编码: 100013 电话: (010) 84262927

电子信箱: jjmjs@263.net