

Modelling of Air and Oxy-fuel Combustion in a Circulating Fluidized Bed

Author

Wojciech Adamczyk

Keywords

fluidization, modeling, dense flows, combustion

Abstract

The paper presents the use of a computer model to simulate the process of fluidization in an industrial boiler at Turów power plant. Air and oxy-fuel combustion was modelled for the study, and the effect of the geometrical model's simplification on the bulk material distribution in the combustion chamber was examined. Numerical simulations were performed using Ansys FLUENT software enhanced with additional user defined functions that were implemented in the calculation procedure. The computer model allowed for the analysis of the effect of solid phase's volume fraction in the combustion chamber on the heat exchange between the bulk material and the boiler's heated surfaces. The computer simulation results showed satisfactory consistence with measured data.

DOI: 10.12736/issn.2300-3022.2016201

1. Introduction

Fluidization is a multi-phase process, where a discrete phase material in particulate form is suspended in a moving fluid. The intensive mixing of bulk material in the fluidizing bed provides adequate exchange of momentum, mass and energy between the material's individual fractions. Fluidized bed boilers are not very sensitive to the quality of the burned fuel, and are characterized by low-cost fuel preparation. An additional benefit of the fluidized bed boilers is low flue gas desulfurization costs. In the case of fluidized bed boilers, the flue gas is desulfurized by way of sulphur oxides' binding with the limestone added to the bed. This method allows one to limit the capital expenditures for new coal fuelled units by eliminating the costly peripherals used for flue gas desulfurization. An additional advantage of the fluidized bed boilers is low NO_x emission. The low combustion temperature has very large effect on the NO_x reduction. However, for reduction of fuel NO_x, primary and secondary methods are needed.

The complicated nature of the fluidization process is associated with highly coupled interfractional interactions, as well as intermolecular interactions in the granular phase. Because of the interactions, and spatial and temporal scales' diversity, modelling of the fluidized bed's hydrodynamics is not a trivial task. The numerical implementation itself of the model of combustion in a fluidized bed is so complex that there are only scarce mentions in the relevant literature of the full, three-dimensional simulation models of large industrial units, which take into account both the combustion process and the interphase impacts. Little is also known about modelling of the oxy-fuel combustion in such units. The oxy-fuel combustion technology allows for reducing harmful

emissions into the atmosphere, with concurrent carbon dioxide capture and storage. The oxidant used in oxy-fuel combustion is a mixture of pure oxygen and recirculated exhaust gases. As a result, the exhaust gases contain almost pure carbon dioxide, which ensures high efficiency of the capture process. The oxy-fuel combustion technology allows abandoning costly absorption installations, and is an attractive alternative to the absorption technology.

The main aim of this study was to develop a mathematical model that allows for modelling the complex process of fluidization in the dense circulating fluidized bed of an industrial boiler. The model and calculation algorithm allow mapping the combustion process in a fluidized bed boiler at the transition from conventional (air) combustion to the oxy-fuel combustion process. For the numerical calculations FLUENT, an Ansys commercial software, extended with additional user defined functions (UDF) was used.

The numerical models of fluidized-bed boilers reported in the literature are mainly two-dimensional and only take into account the flow in the combustion chamber. Only a small percentage of available publications refer to the application of the full boiler model taking into consideration the strong intermolecular impacts and the interactions between the gas and discrete phases [18].

In some numerical models developed to simulate the combustion in a fluidized bed boiler and reported in the literature empirical equations are used for describing the solid phase's behaviour [23]. This technique allows one to skip modelling of the complex interphase interactions, and thus the time required for

numerical calculations is significantly reduced. With this approach no impact of the particle agglomeration on the combustion in a fluidized bed boiler can be identified. For detailed exploration of the processes occurring in a fluidized bed boiler numerical simulations are needed that employ complex three-dimensional models and take into account both the granular flow and combustion process. This is not an easy task due to the diversity of spatial and temporal scales occurring in fluidized bed boilers. In [1] the Euler-Lagrange hybrid model oxygen combustion in a pilot plant was used for modelling [10], which takes into account the strong interaction in solid-phase and the heat exchange by means of chemical reactions alike. This model was then adapted to modelling the conventional combustion process in an industrial fluidized bed boiler with a circulating fluidised bed [2]. This study reports the application of an original computer model for modelling the combustion process in a fluidized bed boiler at Turów power plant. The results of numerical simulations are compared with measurement data, which shows very good agreement between them. Additionally, the effect of the geometrical model's simplification on the calculated temperature profile in the fluidized bed boiler's combustion chamber is analysed.

2. Mathematical model

Depending on the discrete phase treatment, the models used to simulate the transport of particles in a dense granular flow are divided into two main groups. Most used is the Euler model, in which gas and discrete phase are treated as interpenetrating continuous phases [18]. This approach forces continuity between the phases. Major drawbacks of this model include long calculation time resulting from the need to use dense numerical grids, and the inability to directly track the particles distribution. Despite its many disadvantages, this method allows one to take into account the mutual impacts in between individual phases (gas - particle) and the intermolecular interactions based on the solid phase's volume fraction in a given cell, on the basis of the kinetic theory of granular flow (KTGF) [12]. In Euler's approach the actual diameter distribution is usually replaced with a characteristic diameter, which allows a significant reduction in computation time, at the expense of considerable simplification in describing the phenomenon. Taking into account the actual distribution of particles is of particular importance for modelling of the combustion or gasification process, where the particles are subject to wear and cracking. In order to take account of the particle distribution in the Euler model, the population balance can be used, which was extensively described in [5, 17]. A disadvantage of this approach is its numerical instability, which disqualifies this technique in industrial applications. A detailed description of the Euler model, together with its advantages and disadvantages, can be found in the literature [12, 18, 21, 23].

The Lagrange model, which tracks the movement of particles caused by the action of fluid and weight forces, allows direct consideration of particle distribution. The limitation of this method is its application scope, where neglected in the tracking process is the interaction of particles, and overlooked is the effect of the particle's volume fraction on the fluid behaviour.

This method is applicable to the flows in which the solid phase's volume fraction does not exceed 10% (e.g. in pulverized-fuel boilers), whereas in an industrial fluidized bed boiler the solid phase's volume fraction is much higher. A great advantage of the Lagrange model is the relatively simple mechanism of describing the phenomena that occur in a single molecule, such as degassing, combustion, toughness, and weight change. Combination of these two computational techniques in a single Euler-Lagrange hybrid model allows one to take advantage of the both methods' merits, thus eliminating most of their drawbacks. In the hybrid model the gas flow and intermolecular impacts are calculated in the Euler system, while particles are tracked in the Lagrange system. The hybrid model, also known as dense discrete phase model (DDPM), can be used for modelling the process of particles' transport and combustion in a circulating fluidized bed boiler. The hybrid model has common roots with the multi-phase particle in cell method (MP-PIC) [20, 3], based on which is the commercial software Barracuda [4] used for numerical simulation of the fluidization process in an industrial fluidised bed [19]. For the description of intermolecular interactions and interactions between the individual phases the Euler-Lagrange hybrid model employs four-way coupling [9]. The intermolecular impacts are modelled using the KTGF kinetic theory of granular flow that extends the techniques developed within the framework of the kinetic theory of dense gases to a granular medium [7].

Taking into account the intermolecular interactions at the level of individual particles in a dense granular flow based on the Lagrangian approach requires very long calculation times and extensive hardware resources. As already mentioned, in the Euler-Lagrange hybrid model these impacts are calculated in the Euler system, on the basis of the calculated volume fraction of solid phase based on KTGF [20, 3]. The intermolecular stress determined in the Euler system is used in the particle motion equation (1) to calculate the particles' velocity.

$$\frac{d\bar{u}_p}{dt} = F_D(\bar{u}_f - \bar{u}_p) + \frac{\bar{g}(\rho_p - \rho_f)}{\rho_p} - \frac{\nabla p_f}{\rho_p} - \frac{\nabla \cdot \sigma_s}{\rho_p} \quad (1)$$

where: index p – particle parameters, f – fluid, \bar{u} – velocity vector for gas phase and particles, \bar{g} – force of gravity, ρ_p – density, p_f – gas phase pressure, $F_D(u_f - u_p)$ term defines the particles' acceleration due to their resistance to flowing fluid, whereas the element $\nabla p_f / \rho_p$ in the particle motion equation determines the acceleration of particles due to the pressure gradients in their locations, and σ_s – intermolecular interaction stress tensor, which defines the impacts in granular phase calculated using KTGF theory in Euler grid.

Additionally, in order to reduce the cost of numerical calculations, the hybrid model doesn't track individual particles, the number of which in the system by far exceeds a billion. Individual molecules are grouped in batches of particles having the same physical properties. This approach can significantly reduce the time of numerical calculations.

2.1. Modelling of combustion in a fluidized bed boiler

Modelling of combustion in a boiler with a circulating fluidized bed goes two ways. Homogeneous reactions occur in the gas phase, where de-gassed volatiles are burnt, while heterogeneous reactions, i.e. coke breeze burning, occur on the coal surface.

For modelling the volatiles combustion and the interaction between turbulent flow and chemical reactions the eddy dissipation model (EDM) [16] is used. This model is limited with the mixing rate, where the model's assumption is infinitely short chemical reactions time. With this assumption the complicated model describing the rate of each homogeneous reaction can be omitted. Chemical reactions occur in a place where hot products are intensely mixed with cold reactants. In such a case the reactions can occur only when the hot products' share is large enough to maintain a high temperature in the area of chemical reactions, otherwise the combustion process can be rapidly extinguished.

2.2. Oxy-fuel combustion

The need to reduce CO₂ emissions contributes to the development of technologies to reduce them. One of the available options is the capture and storage (CCS) of the carbon dioxide produced by combustion of fuel. CCS systems can be implemented in three ways: CO₂ capture from flue gas, elimination of carbon from the fuel before its combustion, and the oxy-fuel combustion technology. In conventional combustion, where the oxidant is air, CO₂ capture from flue gas is very expensive, due to its low concentration in the flue gas [11]. In order to increase the CO₂ capture efficiency, an alternative technology was developed, called oxy-fuel combustion. It involves combustion of coal in a mixture of recirculated flue gases and the pure oxygen [11, 14, 8, 23] obtained in an air separation unit (ASU). This results in a very high CO₂ concentration in the flue gas, which allows reducing the cost of CO₂ separation. Partially returned (recycled) flue gases, which are cleaned and dried (if flue gas drying is required by the process) are directed to a mixer, where they are mixed with the oxygen produced in the ASU system. The not-returned flue gas stream portion goes to the system of CO₂ capture and preparation for storage, the CO₂ purification unit (CPU).

There are ongoing large-scale studies aimed at adapting (retrofitting) the existing coal-fired units for the oxy-fuel combustion technology. One of the tools that can be used for this purpose is computational fluid dynamics (CFD), which allows for analysis of the impact of various parameters on the performance of a given type of boiler.

3. Model of a compact CFB boiler at Turów power plant

3.1. Numerical model description

A geometric model of a circulating fluidised bed (CFB) at Turów power plant (Unit 5) is shown in Fig. 1b. The fluidized-bed boiler is provided with four particle separators, where the material is recirculated into the combustion chamber through eight external superheaters. The combustion chamber's main dimensions are: height 42 m, depth 10 m, and width 22 m. The numerical

Technical analysis, %		Elemental analysis, %	
Ash	21.8	C	28.82
Water	40.5	H	2.32
Volatiles	22.3	S	0.31
Breeze	15.4	N	0.29
		O	5.96

Tab. 1. Composition of the fuel burned in the CFB boiler at Turów plant

	Lignite	Inert material
Density, kg/m ³	1300	1800
Average diameter, μm	325	330
Max. diameter, μm	2000	1000
Min. diameter, μm	50	50
Distribution parameter	1.25	1.35
No. of diameters	6	8

Tab. 2. Grain distribution parameters in Rosin-Rammler model

simulations were carried out using the boiler's full geometry (with some simplification), and the boiler's simplified model, which the outer bulk material recirculation loop was replaced by user defined functions. The numerical simulations for oxy-fuel combustion were carried out for various input data in order to examine the individual parameters' impact on the combustion chamber's performance. This impact was determined on the basis of an analysis of the temperature profiles, which were compared with measurements for the boiler operating in the air mode.

In the presented simulations the combustion process was modelled using a two-stage reaction mechanism for combustion of volatile matter, and a single-stage reaction for combustion of coke breeze. In order to stabilize the numerical solution, the continuity equation was discretized using the QUICK scheme, while for the other transport equations a discretization scheme of the second order (against the wind) was used. When modelling such a complex process as fluidization, one of the most important aspects is suitable modelling of the material's distribution in the calculation cell. During the simulation a model was used to allow for averaging the volume fractions in each node of the calculation cells, so called node base averaging, which had greatly improved the calculation procedure's convergence.

Turów power station's boilers are fuelled with lignite of the composition shown in Tab. 1. The lignite's calorific value was 10,600 kJ / kg. To map the distribution of grains in the numerical simulations the Rosin-Rammler distribution model was used, and the inputs to the model are listed in Tab. 2.

Input parameters for numerical simulations are listed in Tab. 3. The oxidant stream in the oxy-fuel combustion was equal to the oxidant stream fed to the combustion chamber at conventional combustion, in order to ensure the same hydrodynamics of the fluidized bed at the transition between the operating modes.

	AIR	OXY 1	OXY 2	OXY 3	OXY 4
Lignite stream, kg/s	52.6				
Oxidant stream, kg/s	274.5				
$X_{O_2, utl}$, %	20.92	32.09	28.81	27.31	28.19
$X_{CO_2, utl}$, %	0.00	62.22	61.69	63.11	54.86
$X_{H_2O, utl}$, %	0.00	1.92	2.30	2.32	8.24
$X_{N_2, utl}$, %	78.93	3.77	7.21	7.26	8.71
H ₂ O reduction in rec. flue gases	70%			30%	
Rec. temp. of material, °C	800–900				
Oxidant temp. °C	277				
Lignite temp. °C	100				

Tab. 3. Analysed cases and inputs to numerical simulation

3.2. Effect of geometry simplifications on simulation results

The boiler's actual geometry cannot be reflected in the numerical model due to the large difference between its dimensions and the size of space discretizing elements (numerical grid elements). Capturing its structural details requires denser divisions of the numerical grid, which significantly extends the time required to obtain results. Often minor structural details have no significant impact on the calculation result, so a common practice is to simplify the model in order to speed up calculations and to improve the numerical model's convergence. In order to reduce the number of numerical grid elements, the evaporator walls had been simplified to flat surfaces, where heat transfer was resolved by a one-dimensional model. The walls' constant temperature (357°C) was assumed, as well as their thickness and material properties. Furthermore, the geometrical model didn't reflect the complex geometry of the grate, which was replaced by a flat surface, through which a portion of the primary oxidant was fed. Further geometry simplifications involved the omission of modelling the flow in the fluidized bed boiler's recirculation

circuit (separator, runoff channels, siphon). The study included an analysis which compared the effects of the recirculation flow modelling omission. The following two cases were analysed:

- model of full combustion chamber and recirculation system geometry
- simplified model of combustion chamber without recirculation system.

The numerical grids developed for the full and simplified geometry are shown in Fig. 1 (left). The numerical grid used in the numerical simulations for the full model contained 1.3 million elements, while the number for the simplified model was reduced to 600,000 elements.

Since the simplified model was reduced to the combustion chamber, the material's recirculation was simulated by appropriate algorithms implemented to the calculation procedure, using a set of user defined functions. In order to examine the model simplifications' effects on the calculated profile of pressure and temperature in the combustion chamber, the numerical simulations were carried out using the full and simplified geometrical models of the boiler. The pressure profiles calculated across the combustion chamber height for the full and simplified boiler models are shown in Fig. 2. The comparison of the numerical simulation results for cases AIR and OXY 1, as well as for the full and simplified models, had proven their good consistency. The comparison of the individual profiles obtained from the simulation and the measurement data, the temperature profiles in particular, had indicated relatively large inconsistency for the model with full boiler geometry. This was a direct effect of the amount of material transported in the combustion chamber. For the full model the material weights significantly more compared to the measured data and the simplified model, as can be seen in Fig. 3. Increase in weight of the material transported in the combustion chamber increases the heat flux transmitted to the boiler walls, thereby decreasing the combustion chamber temperature. Stabilising the amount of bulk material in

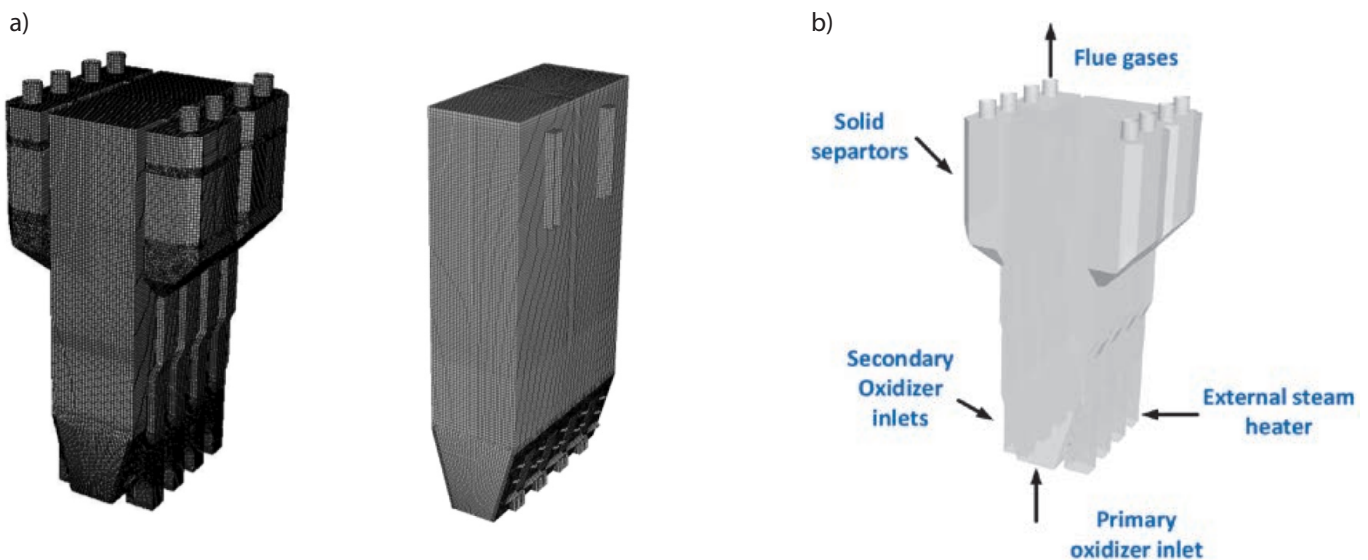


Fig. 1. Numerical grid for the full and simplified geometry (a), geometrical model of the boiler (b)

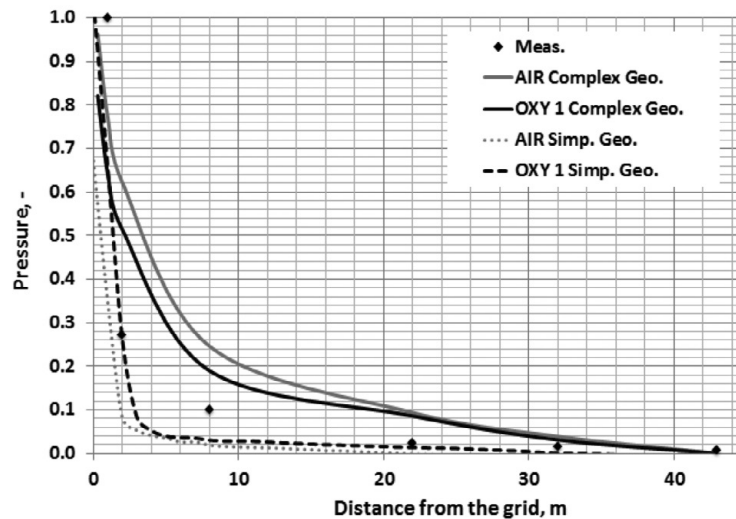


Fig. 2. Pressure profiles in combustion chamber determined for simplified and full fluidized bed boiler geometries

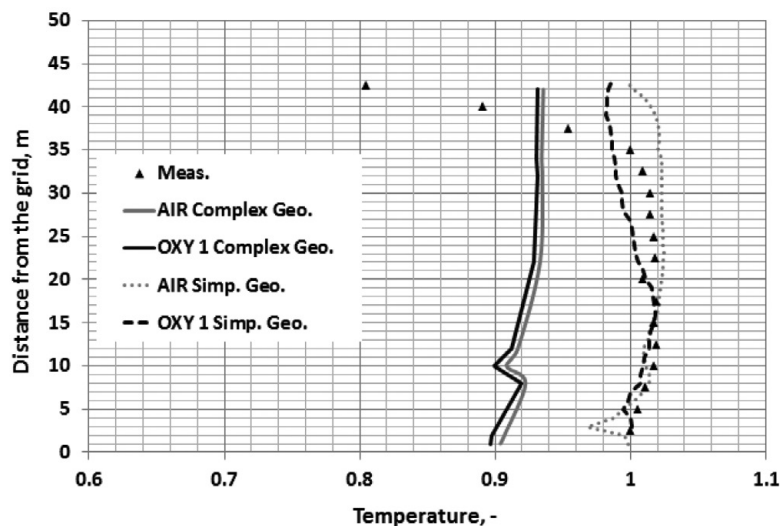


Fig. 3. Temperature profiles in combustion chamber determined for simplified and full fluidized bed boiler geometries

the chamber for the full model was a very difficult task because of the simplifications in the elements of the reversing system's geometry. Taking into account the reversing system's complex geometry should significantly improve the material distribution in the model of the fluidized bed boiler's full geometry, but it would have a significant impact on the stability of the transport equations' solutions, and would significantly prolong the numerical simulations. At the full boiler geometry simulation, the weight of the material transported in the combustion chamber was 170 tons, while for the simplified model it was maintained at 130 tons. The weight of the material in the combustion chamber during the numerical calculation was calculated from the pressure profile using the pressure gauge equation.

3.3. Effect of thermal radiation on simulation results

The effect of a model describing thermal radiation on temperature profiles in the combustion chamber was analysed as part of

the study. These simulations were performed for air combustion (AIR) only, due to the very long numerical computation time when using an advanced model to determine the radiative properties of gases at oxy-fuel combustion. The Discrete Ordinates model [15], in which the absorption coefficient was calculated using the Smith model [13], was used for modelling the radiative heat transfer. These simulations were designed to examine the effect of radiative heat transfer in a fluidized bed boiler's combustion chamber on the calculated temperature profiles. In the case of modelling the combustion in pulverized fuel boilers, due to the heterogeneous and high temperature in the combustion chamber, the effect of radiation on heat transfer cannot be neglected. This is contrary to the conditions in a fluidized bed boiler's combustion chamber, where the temperature is maintained at a relatively low level. In addition, the temperature in a fluidized bed boiler's combustion chamber is generally levelled, which greatly reduces the radiation effect on heat exchange in the combustion chamber. In a CFB boiler the predominant heat transfer

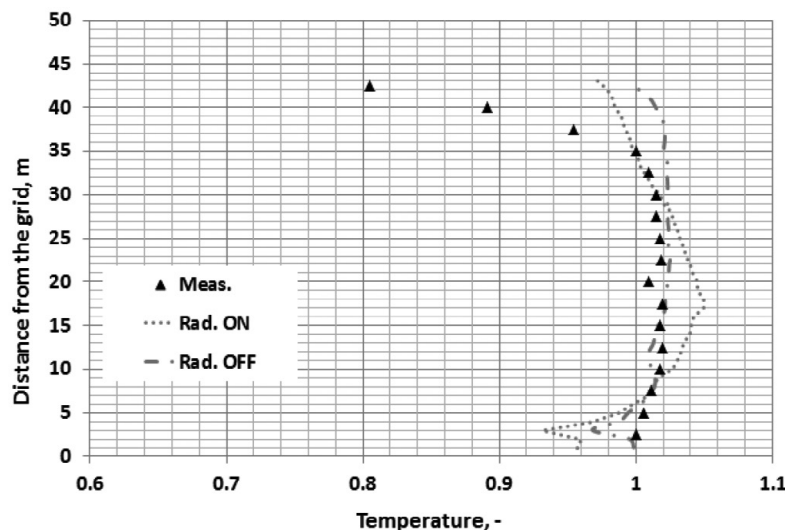


Fig. 4. Temperature profiles in combustion chamber determined with taking into account heat transfer by radiation and disregarding its effect

mechanisms are conduction and convection. This is caused mainly by the solid phase's large volume fractions, in the vicinity of the boiler walls in particular. On the basis of this information, the omission of radiative heat transfer in numerical simulations should be justified; however, in order to confirm this hypothesis two numerical simulations were conducted.

The resulting temperature profiles across the combustion chamber for the simulation with the radiation model on and off were compared with the measured data, as illustrated in Fig. 4. From the obtained results slight differences can be observed between the fluidised bed boiler model taking into account the radiation effect, and the model without the heat transfer by radiation, which confirms the low impact of radiation on the overall heat transfer in a fluidized bed boiler. Similar observations are reported in [6], where a CFB boiler with similar geometry was simulated using a fluidized bed boiler's semi-empirical model. The comparison of numerical simulation results with measurement data shows some differences in the combustion chamber's bottom and top parts, which is due to simplifications adopted in the fluidized bed boiler's geometrical model.

3.4. Effect of oxidant composition on simulation results

A series of numerical simulations was performed to test the effects of various oxidant compositions on the calculated temperature profile and flue gas composition in the combustion chamber of a fluidized bed boiler operating in the oxy-fuel combustion technology. Listed in Tab. 4 are the average flue gas composition at the outlet of the combustion chamber of a fluidized bed boiler operating in the oxy-fuel combustion technology. The comparison of the resulting flue gas composition shows clear differences between conventional combustion in air and oxy-fuel combustion. The resulting flue gas composition in OXY 1-4 cases allows a preliminary estimate of the potential adaptation of the tested fluidized bed boiler operating in the oxy-combustion to the CCS technology.

	AIR	OXY 1	OXY 2	OXY 3	OXY 4
$X_{O_2,spa}$, %	2.7	5.8	2.8	1.7	2.71
$X_{CO_2,spa}$, %	13.6	67.1	68.9	70.1	64.8
$X_{H_2O,spa}$, %	14.6	21.6	21.3	21.6	25.7
$X_{N_2,spa}$, %	69.1	5.5	7.0	6.6	6.8

Tab. 4. Flue gas composition at combustion chamber outlet for various oxidant compositions

The numerical simulations also allowed an estimate of the effects of various oxidant compositions on the calculated temperature profile in the combustion chamber of the fluidized bed boiler operating in the oxy-fuel combustion technology. The resulting temperature profiles are shown in Fig. 5. The numerical simulation results were compared only with the temperature profile measured in the boiler operating in the air combustion mode. The numerical simulations are only hypothetical, aiming solely at testing the boiler's thermal response to changed oxidant composition. It can be concluded based on the profiles obtained for the oxy-fuel combustion (OXY) cases that the boiler's thermal response to changed oxidant composition is close to the air combustion case. The resulting temperature profiles in the OXY 1-3 case differ only in the combustion chamber's upper part. In OXY 4 the differences are also apparent in the combustion chamber's lower region (in the vicinity of the nozzles), which was caused by an increase in the share of water vapor in the oxidant fed to the combustion chamber.

4. Summary

This paper presents the development of a mathematical model allowing one to simulate the phenomena of heat, weight and momentum flows in a fluidized bed boiler. This model was implemented to commercial CFD Ansys Fluent code, which was extended with appropriate user defined functions. Complex

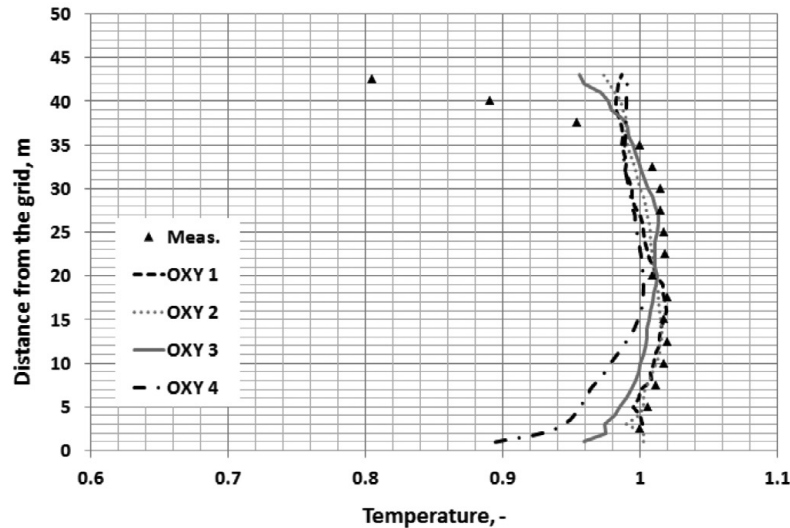


Fig. 5. Temperature profiles in combustion chamber determined for various oxidant compositions

processes of the fluidized bed dynamics were modelled using the Euler-Lagrange hybrid model, also known as dense discrete phase model (DDPM).

Subject to the simulation was the operation of a boiler with a circulating fluidized bed at Turów power plant (Unit 5). The numerical simulation results were compared with measurements taken at the boiler's operation in the air combustion mode. The temperature profiles obtained from the model are similar to the measurements. The undoubted disadvantage of this model is the long numerical calculation time, which often reaches up to one month, which may eliminate it from some direct engineering applications.

The simulation results obtained for the full and simplified geometry demonstrate the possibility of reducing the time required to perform the calculations by reducing the geometrical model to the combustion chamber alone. The recirculation system consisting of a separator, runoff pipe and siphon is then replaced by appropriate algorithms that allow one to recirculate the CFB bed material. The results for the simplified model, despite considerable simplifications, show good consistency with measured data.

Also analysed as part of the study was the effect of a model describing thermal radiation on temperature profiles in the combustion chamber. The simulation results confirm the conduction and convection mechanism's significant impact on the heat transfer process in a CFB boiler, due to the large volume fractions of the solid phase, especially in the area of the boiler walls. The results for the models taking into account and neglecting heat radiation are comparable, which allows justifying the omission of radiative heat transfer in the numerical simulations of CFB boilers. As part of the study many numerical simulations were performed in order to estimate the impact of various oxidant compositions on the calculated temperature profile and flue gas compositions. The developed computer model allows one to analyse the boiler's various operating modes, and can be extremely useful in analysing the possibilities of retrofitting CFB boilers for oxy-fuel combustion.

Acknowledgements

The study was completed within the framework of the Strategic Programme for Research and Development "Advanced technologies for energy generation, Research Task No. 2, Development of an oxy-fuel combustion technology for pulverized fuel and fluidised bed boilers integrated with CO₂ capture," subsidised by the NCBR under contract SP/E/ 2/66420/10.

REFERENCES

1. W.P. Adamczyk et al., Modeling oxy-fuel combustion in a 3D circulating fluidized bed using the hybrid Euler-Lagrange approach, *Applied Thermal Engineering*, Vol. 71, 2014(a), pp. 266-275.
2. W.P. Adamczyk et al., Modeling of particle transport and combustion phenomena in a large-scale circulating fluidized bed boiler using a hybrid Euler-Lagrange approach, *Particuology*, Vol. 16, 2014(b), pp. 29-40.
3. M.J. Andrews, P.J. O'Rourke, The multifluid particle-in-cell (MP-PIC) method for dense particulate flows, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 22(2), 1996, pp. 379-402.
4. BARRACUDA, 2004. CPFD Software: <http://cpfd-software.com>
5. J. Bałdyga, W. Orciuch, A. Krasiński, Application of population balance to study complex particulate processes, *Czasopismo Techniczne*, Vol. 105, 2008, pp. 13-27.
6. M. Bordbar, K. Myohanen, T. Hyppanen, Coupling of a radiative heat transfer model and a three-dimensional combustion model for a circulating fluidized bed furnace, *Applied Thermal Engineering*, 2014.
7. S. Chapman, S. Cowling, The mathematical theory of non-uniform gases, Cambridge: Cambridge Univ. Press 1970.
8. L. Chen, S. Zheng, A.F. Ghoniem, Oxy-fuel combustion of pulverized coal: characterization, fundamentals, stabilization and CFD modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2012, pp. 156-214.
9. C.T. Crowe et al., Multiphase flows with droplets and particles, Taylor & Francis Group, 2012.

10. T. Czakiert et al., Oxy-fuel circulating fluidized bed combustion in a small pilot-scale test rig, *Fuel Processing Technology*, Vol. 91 Issue 11, 2010, pp. 1617–1623.
11. P. Edge et al., Combustion modelling opportunities and challenges for oxy-coal carbon capture technology, *Chemical Engineering Research and Design*, Vol. 89, Issue 9, 2011, pp. 1470–1493.
12. D. Gidaspow, *Multiphase Flow and Fluidization*. Boston MA., Academic Press 1994.
13. R. Johansson et al., Account for variations in the H₂O to CO₂ molar ratio when modelling gaseous radiative heat transfer with the weighted-sum-of-grey-gases model, *Combustion and Flame*, 2011, pp. 893–901.
14. R. Jovanovic et al., Numerical investigation of influence of homogeneous/heterogeneous ignition/combustion mechanisms on ignition point position during pulverized coal combustion in oxygen enriched and recycled flue gases atmosphere, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 54, 2011, pp. 921–931.
15. G. Krishnamoorthy, A new weighted-sum-of-gray-gases model for CO₂–H₂O gas mixtures, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 2010, pp. 1182–1186.
16. B.F. Magnussen, B.H. Hjertager, On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion, In 16th Symp. on Combustion 1976.
17. L. Mazzei, D.L. Marchisio, P. Lettier, Direct quadrature method of moments for mixing of inert poly-disperse fluidized powders and the role of numerical diffusion, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol. 49(11), 2003, pp. 5141–5152.
18. K. Myohanen, T. Hyppanen, A three-dimensional model frame for modelling combustion and gasification in circulating fluidized bed furnaces, *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, Vol. 9(A15), 2011, pp. 55.
19. D. Snider, S. Banerjee, Heterogeneous gas chemistry in the CPFD Eulerian–Lagrangian numerical scheme (ozone decomposition), *Powder Technology* 2010, Vol. 199, pp. 100–106.
20. D.M. Snider, P.J. O'Rourke, M.J. Andrews, Sediment flow in inclined vessels calculated using a multiphase particle-in-cell model for dense particle flows, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 24, 1998, pp. 1359–1382.
21. M. Syamlal, W. Rogers, T.J. O'Brien, MFX Documentation, National Technical Information Service 1993.
22. R. Wischnewski et al., Reactive gas–solids flows in large volumes 3D modeling of industrial circulating fluidized bed combustors, *Particology*, Vol. 8(1), 2010, pp. 67–77.
23. N. Zhang et al., 3D CFD simulation of hydrodynamics of a 150MWe circulating fluidized bed boiler, *Chemical Engineering Journal*, Vol. 162, 2010, pp. 821–28.

Wojciech Adamczyk

Silesian University of Technology

email: wojciech.adamczyk@polsl.pl

He graduated from the Faculty of Energy and Environmental Engineering at the Silesian University of Technology (2009). He was awarded a doctoral degree at the Faculty of Energy and Environmental Engineering (2014). Since 2014, he has been working as an assistant professor at the Thermal Technology Institute. His interests include the modelling of heat, mass and momentum exchange in pulverized fuel and fluidized-bed furnaces, modelling of blood flow in selected parts of the human cardiovascular system, and non-destructive testing of thermal diffusivity using reverse methods.

This is a supporting translation of the original text published in this issue of "Acta Energetica" on pages 6–13. When referring to the article please refer to the original text.

PL

Modelowanie procesu spalania powietrznego oraz tlenowego w cyrkulacyjnej warstwie fluidalnej

Autor

Wojciech Adamczyk

Słowa kluczowe

kotły fluidalne, modelowanie, gęste przepływy, spalanie

Streszczenie

W pracy przedstawiono wykorzystanie modelu komputerowego do symulacji procesu fluidyzacji w przemysłowym kotle elektrowni Turów. W pracy modelowany był proces spalania powietrznego oraz tlenowego, a także badany był wpływ uproszczeń modelu geometrycznego na dystrybucję materiału sypkiego w komorze spalania. Symulacje numeryczne zostały przeprowadzone z wykorzystaniem oprogramowania Ansys FLUENT rozszerzonego o dodatkowe funkcje użytkownika, które zostały zaimplementowane do procedury obliczeniowej. Opracowany model komputerowy pozwolił na analizę wpływu udziału objętościowego fazy stałej w komorze spalania na proces wymiany ciepła pomiędzy materiałem sypkim a powierzchniami ogrzewalnymi kotła. Wyniki symulacji komputerowych pokazały zadowalającą zgodność z danymi pomiarowymi.

1. Wprowadzenie

Proces fluidyzacji jest procesem wielofazowym, w którym materiał fazy rozproszonej w postaci cząstek stałych jest zawieszony w poruszającym się płynie. Intensywne mieszanie materiału sypkiego mające miejsce w złożu fluidalnym zapewnia odpowiednią wymianę pędu, masy oraz energii pomiędzy poszczególnymi frakcjami materiału. Kotły pracujące w technologii fluidalnej są mało wrażliwe na jakość spalanego paliwa, a także cechują się niskimi kosztami przygotowania paliwa. Dodatkową korzyścią stosowania kotłów fluidalnych są niskie koszty odsiarczania spalin, gdzie proces odsiarczania spalin odbywa się poprzez wiązanie tlenków siarki z kamieniem wapiennym dodawanym do złoża. Taka metoda pozwala na ograniczenie nakładów inwestycyjnych przy budowie nowych jednostek węglowych, przez wyeliminowanie kosztownych instalacji peryferyjnych wykorzystywanych do odsiarczania spalin. Dodatkowym atutem kotłów fluidalnych jest niska emisja związków NO_x . Bardzo duży wpływ na redukcję NO_x ma niska temperatura procesu spalania. W przypadku konieczności redukcji paliwowych tlenków azotu konieczne jest jednak wykorzystanie metod pierwotnych oraz wtórnych.

Skomplikowany charakter procesu fluidyzacji jest związany z silnie sprzężonymi oddziaływaniami międzyfazowymi, jak również oddziaływaniami międzycząsteczkowymi w fazie granularnej. Występujące oddziaływanie, zróżnicowanie skal czasowych i przestrzennych sprawia, że modelowanie hydrodynamiki złoża fluidalnego nie jest zadaniem trywialnym. Sama implementacja numeryczna modelu spalania w warstwie fluidalnej jest na tyle złożona, że praktycznie brak w literaturze wzmianki o pełnych, trójwymiarowych modelach symulacyjnych dużych jednostek przemysłowych uwzględniających równocześnie proces spalania oraz oddziaływanie międzyfazowe. Niewiele także wiadomo o modelowaniu procesu spalania tlenowego w jednostkach tego typu. Spalanie tlenowe (*oxy-fuel combustion*) jest technologią pozwalającą na ograniczenie emisji szkodliwych związków do atmosfery,

przy równoczesnym zastosowaniu technologii wychwytu oraz składowania dwutlenku węgla. W spalaniu tlenowym jako utleniacz wykorzystywana jest mieszanina czystego tlenu i recykulowanych spalin. W rezultacie spaliny zawierają prawie czysty dwutlenek węgla, co zapewnia dużą sprawność procesu wychwytu. Zastosowanie technologii spalania tlenowego pozwala na rezygnację z kosztownych instalacji absorpcyjnych i stanowi atrakcyjną alternatywę dla technologii absorpcyjnej.

Głównym celem pracy było zbudowanie modelu matematycznego pozwalającego na modelowanie złożonego procesu fluidyzacji w gęstej cyrkulacyjnej warstwie fluidalnej przemysłowego kotła fluidalnego. Opracowany model oraz algorytm obliczeń pozwala na odwzorowanie procesu spalania w kotle fluidalnym przy przejściu ze spalania konwencjonalnego (powietrznego) na proces spalania tlenowego. Do obliczeń numerycznych wykorzystano komercyjne oprogramowanie Ansys FLUENT, rozszerzone o dodatkowe funkcje użytkownika (ang. *User Defined Functions* – UDF). Opisane w literaturze modele numeryczne kotłów fluidalnych dotyczą głównie modelu dwuwymiarowego, uwzględniającego przepływ wyłącznie w komorze spalania. Tylko niewielka liczba dostępnych publikacji przedstawia wykorzystanie pełnego modelu kotła przy równoczesnym uwzględnieniu silnego oddziaływania międzycząsteczkowego oraz oddziaływania pomiędzy fazą gazową i rozproszoną [18].

W niektórych modelach numerycznych opisanych w literaturze, wykorzystywanych do modelowania procesu spalania w kotle fluidalnym, do opisu zachowania fazy stałej wykorzystuje się równania empiryczne [23]. Takie podejście umożliwia pominięcie modelowania złożonych oddziaływań międzyfazowych, a przez to wymagany czas obliczeń numerycznych ulega znacznemu skróceniu. Wykorzystując modele empiryczne, nie jest możliwe uchwycenie wpływu aglomeracji cząsteczek na proces spalania w kotle fluidalnym. W celu dokładnego poznania procesów zachodzących w kotłach fluidalnych konieczne jest prowadzenie

symulacji komputerowych, wykorzystując skomplikowane modele trójwymiarowe, uwzględniając wymianę pędu, oraz masy w gęstym przepływie granularnym. Nie jest to zadanie łatwe, ze względu na zróżnicowanie skal przestrzennych i czasowych występujących w kotłach fluidalnych. W pracy [1] do modelowania procesu spalania tlenowego w instalacji pilotażowej [10] został wykorzystany model hybrydowy Eulera-Lagrange'a, który równocześnie uwzględniał silne interakcje w fazie stałej oraz wymianę ciepła na drodze reakcji chemicznych. Model ten został następnie zaadaptowany do modelowania procesu spalania konwencjonalnego w przemysłowym kotle fluidalnym z cyrkulacyjną warstwą fluidalną [2].

W pracy opisano zastosowanie opracowanego modelu komputerowego do modelowania procesu spalania w kotle fluidalnym elektrowni Turów. Wyniki symulacji numerycznych zostały zestawione z danymi pomiarowymi, prezentując bardzo dobrą zgodność z danymi pomiarowymi. Dodatkowo przeanalizowano wpływ uproszczeń modelu geometrycznego na obliczany profil temperatury w komorze spalania kotła fluidalnego.

2. Model matematyczny

W zależności od sposobu traktowania fazy rozproszonej, modele wykorzystywane do symulacji transportu cząstek w gęstym przepływie granularnym zostały podzielone na dwie podstawowe grupy. Najczęściej wykorzystuje się model Eulera, w którym fazy gazowe oraz rozproszone traktowane są jak wzajemnie przenikające się fazy ciągłe [18]. Takie podejście wymusza ciągłość pomiędzy fazami. Spośród głównych wad tego modelu należy wymienić długi czas obliczeń wynikający z konieczności stosowania gęstych siatek numerycznych oraz braku możliwości bezpośredniego śledzenia rozkładu cząstek. Mimo wielu wad tej metody pozwala ona uwzględnić wzajemne oddziaływanie pomiędzy poszczególnymi fazami (gaz – cząstka) oraz interakcje międzycząsteczkowe na podstawie udziału objętościowego fazy stałej w danej komórce, w oparciu o kinetyczną teorię przepływu granularnego

(ang. *Kinetic Theory of Granular Flow – KTGF*) [12]. W podejściu Eulera rozkłada się zwykle zastępowany jedną charakterystyczną średnicą, co pozwala na znaczącą redukcję czasu obliczeń, kosztem sporych uproszczeń w opisie zjawiska. Uwzględnienie rzeczywistego rozkładu cząstek ma szczególne znaczenie w przypadku modelowania procesu spalania lub zgazowania, gdzie cząsteczki ulegają ścieraniu oraz pękaniu. W celu uwzględnienia rozkładu cząstek w modelu Eulera można wykorzystać bilans populacji, który został obszernie opisany w pracach [5, 17]. Wadą tego podejścia jest jego niestabilność numeryczna, co dyskwalifikuje tę technikę w zastosowaniach przemysłowych. Szczegółowy opis modelu Eulera, jego wady oraz zalety można znaleźć w literaturze [12, 18, 21, 23].

Model Lagrange’a, w którym śledzony jest ruch cząstek wywołany działaniem płynu i sił masowych, umożliwia bezpośrednie uwzględnienie rozkładu cząstek. Ograniczeniem tej metody jest jej zakres zastosowania, gdzie w procesie śledzenia zaniedbuje się wzajemne oddziaływanie cząstek oraz pomijany jest wpływ udziału objętościowego cząstki na zachowanie płynu. Metoda ta znajduje zastosowanie w przepływach, w których udział objętościowy fazy stałej nie przekracza 10% (np. w kotłach pyłowych), podczas gdy w przemysłowym kotle fluidalnym udział objętościowy fazy stałej jest dużo większy. Dużą zaletą modelu Lagrange’a jest stosunkowo prosty mechanizm opisu zjawisk zachodzących w pojedynczej cząsteczce, takich jak odgazowanie, spalanie pęknięcie, czy zmiana masy.

Połączenie dwóch wspomnianych technik obliczeniowych w jeden model hybrydowy Eulera-Lagrange’a pozwala wykorzystać zalety obydwu metod, eliminując tym samym większość ich wad. W modelu hybrydowym przepływ gazu oraz oddziaływanie międzycząsteczkowe obliczane są w układzie Eulera, podczas gdy śledzenie cząstek odbywa się w układzie Lagrange’a. Model hybrydowy, zwany także gęstym modelem fazy rozproszonej (ang. *Dense Discrete Phase Model – DDPM*), może być wykorzystany do modelowania procesu transportu oraz spalania cząstek w cyrkulacyjnym kotle fluidalnym. Model hybrydowy ma wspólne korzenie z wielofazową metodą śledzenia cząstek w komórkach obliczeniowych (ang. *Multiphase Particle in Cell – MP-PIC*) [20, 3], na której bazuje komercyjny oprogramowanie Barracuda [4], wykorzystywane do symulacji numerycznych procesu fluidyzacji w przemysłowych instalacjach fluidalnych [19]. Model hybrydowy Eulera-Lagrange’a w opisie oddziaływań międzycząsteczkowych oraz oddziaływań pomiędzy poszczególnymi fazami wykorzystuje tzw. sprzężenie czterostronne (ang. *four-way coupling*) [9]. Oddziaływania międzycząsteczkowe modelowane są z wykorzystaniem kinetycznej teorii przepływu granularnego KTGF, która przenosi techniki opracowane w ramach kinetycznej teorii gęstych gazów na ośrodek granularny [7].

Uwzględnienie oddziaływań międzycząsteczkowych na poziomie pojedynczych cząstek w gęstym przepływie granularnym w oparciu o podejście Lagrange’a wymaga bardzo długich czasów obliczeń oraz dużych

zasobów sprzętowych. Jak już zostało wcześniej wspomniane, w modelu hybrydowym Eulera-Lagrange’a oddziaływanie te obliczane są w układzie Eulera, na podstawie obliczonego udziału objętościowego fazy stałej w oparciu o KTGF [20, 3]. Wyznaczony w układzie Eulera gradient naprężeń międzycząsteczkowych wykorzystywany jest przez równanie ruchu cząstki (1) do obliczenia prędkości cząstek.

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = F_D(\vec{u}_f - \vec{u}_p) + \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho_f)}{\rho_p} - \frac{\nabla p_f}{\rho_p} - \frac{\nabla \cdot \sigma_s}{\rho_p} \quad (1)$$

gdzie: index p – parametry cząstki, f – płyn, \vec{u} – wektory prędkości dla fazy gazowej oraz cząstki, \vec{g} – siła grawitacji, ρ – gęstość, p – ciśnienie fazy gazowej, $F_D(\vec{u}_f - \vec{u}_p)$ określa opór cząstki stawiany przepływającemu płynowi, człon $\nabla p/\rho_p$ określa przyspieszenie cząstki wynikające z różnicy ciśnień w miejscu, gdzie znajduje się cząstka, oraz σ_s jest tensorem określającym naprężenia międzycząsteczkowe dla fazy granularnej obliczony z wykorzystaniem teorii KTGF.

Dodatkowo w celu zmniejszenia kosztu obliczeń numerycznych model hybrydowy nie śledzi pojedynczych cząstek, których liczba w układzie znacznie przekracza bilion. Pojedyncze cząsteczki grupowane są w paczki cząstek o tych samych własnościach fizycznych. Takie podejście pozwala na znaczne skrócenie czasu obliczeń numerycznych.

2.1. Modelowanie procesu spalania w kotle fluidalnym

Modelowanie procesu spalania w kotle z cyrkulacyjną warstwą fluidalną przebiega dwutorowo. Reakcje homogeniczne przebiegają w fazie gazowej, gdzie odbywa się spalanie odgazowanych części lotnych oraz reakcje heterogeniczne przebiegające na powierzchni węgla – spalanie koksiku.

Do modelowania procesu spalania części lotnych oraz interakcji pomiędzy przepływem turbulentnym a reakcjami chemicznymi wykorzystywany jest model wirowy (ang. *Eddy Dissipation Model – EDM*) [16]. Model ten jest ograniczony szybkością mieszania, gdzie założeniem modelu jest nieskończenie krótki czas reakcji chemicznych. Dzięki temu założeniu skomplikowany model opisujący szybkość poszczególnych reakcji homogenicznych może być pominięty. Reakcje chemiczne przebiegają w miejscu, gdzie następuje intensywne mieszanie gorących produktów z zimnymi reagentami. Reakcje w takim przypadku mogą zająć jedynie wtedy, gdy udział gorących produktów jest na tyle duży, aby utrzymać wysoką temperaturę w strefie reakcji chemicznych, w przeciwnym razie proces spalania może ulec gwałtownemu wygaszeniu.

2.2. Spalanie tlenowe

Potrzeba zmniejszenia emisji CO₂ przyczynia się do rozwoju technologii pozwalających na ograniczenie emisji tego związku. Jedną z dostępnych możliwości jest zastosowanie technologii wychwytywania i składowania dwutlenku węgla powstałego w wyniku procesów spalania paliwa (ang.

Carbon Capture and Storage – CCS). Układy CCS mogą być realizowane na trzy sposoby: wychwyt CO₂ z produkowanych spalin, eliminacja węgla z paliwa przed procesem spalania oraz wykorzystanie technologii spalania tlenowego. W spalaniu konwencjonalnym, gdzie jako utleniacz wykorzystywane jest powietrze, wychwyt CO₂ ze spalin jest bardzo kosztowny, ze względu na niskie stężenie tego związku w spalinach [11]. W celu zwiększenia efektywności wychwyty CO₂ została opracowana technologia alternatywna, zwana spalaniem tlenowym (ang. *oxy-fuel combustion*). Polega ona na spalaniu węgla w mieszaninie recykulowanych spalin oraz czystego tlenu [11, 14, 8, 23], otrzymywanego w układzie separacji powietrza (ang. *Air Separation Unit – ASU*). Uzyskuje się w ten sposób bardzo wysokie stężenie CO₂ w produkowanych spalinach, co pozwala na zredukowanie kosztów separacji CO₂. Częściowo zawrócone (recykulowane) spaliny, które są oczyszczane oraz osuszone (jeżeli suszenie spalin jest wymagane przez proces), kierowane są do mieszalnika, gdzie następuje ich zmieszanie z tlenem wyprodukowanym w układzie ASU. Niezawrócona część strumienia spalin trafia do instalacji wychwyty oraz przygotowania CO₂ do składowania (ang. *CO₂ Purification Unit – CPU*). Obecnie prowadzone są zakrojone na szeroką skalę badania mające na celu adaptację istniejących bloków węglowych do technologii spalania tlenowego, tzw. retrofitting. Jednym z narzędzi, które może być wykorzystywane do tego celu, jest numeryczna mechanika płynów (ang. *Computational Fluid Dynamics – CFD*), pozwalająca na analizę wpływu różnych parametrów na pracę kotła danego typu.

3. Model kompaktowego kotła CFB elektrowni Turów

3.1. Opis modelu numerycznego

Model geometryczny kotła z cyrkulacyjną warstwą fluidalną (ang. *circulating fluidized bed – CFB*) elektrowni Turów (Blok 5) został przedstawiony na rys. 1b. Kocioł fluidalny wyposażony jest w cztery separatory cząstek, gdzie materiał do komory spalania recykulowany jest przez osiem zewnętrznych przegrzewaczy pary. Główne wymiary komory spalania to: wysokość 42 m, głębokość 10 m oraz szerokość 22 m. Symulacje numeryczne zostały przeprowadzone z wykorzystaniem pełnej geometrii kotła (z pewnymi uproszczeniami) oraz uproszczonego modelu kotła, w którym zewnętrzna pętla recyrkulacji materiału sypanego została zastąpiona funkcjami użytkownika. Symulacje numeryczne dla spalania tlenowego zostały przeprowadzone dla różnych danych wejściowych w celu przeanalizowania wpływu poszczególnych parametrów na pracę komory spalania. Wpływ ten był określany na podstawie analizy profili temperatury, które były porównywane z danymi pomiarowymi dla kotła pracującego w trybie powietrznym.

W prezentowanych symulacjach proces spalania był modelowany z wykorzystaniem dwustopniowego mechanizmu reakcji dla spalania części lotnych oraz jednostopniowej reakcji dla spalania koksiku. W celu ustabilizowania rozwiązania numerycznego równanie ciągłości było dyskretyzowane za pomocą schematu QUICK, dla pozostałych

równań transportu wykorzystywany był schemat dyskretyzacji drugiego rzędu (pod wiatr). Podczas modelowania tak złożonego procesu, jakim jest fluidyzacja, jednym z ważniejszych aspektów jest odpowiednio modelowanie dystrybucji materiału w komórce obliczeniowej. W trakcie symulacji wykorzystano model pozwalający na uśrednienie udziałów objętościowych w poszczególnych węzłach komórek obliczeniowych (z ang. *node base averaging*), co znacznie poprawiło zbieżność procedury obliczeniowej.

W kotłach elektrowni Turów jako paliwo wykorzystywany jest węgiel brunatny, którego skład przedstawia tab. 1. Wartość opałowa spalane go węgla wynosiła 10 600 kJ/kg. Do odwzorowania rozkładu ziaren w symulacjach numerycznych został wykorzystany model rozkładu Rosina-Rammlera, gdzie dane wejściowe do tego modelu zostały zebrane w tab. 2.

Parametry wejściowe do symulacji numerycznych zostały zebrane w tab. 3. Strumień utleniacza w przypadku spalania tlenowego było równy strumieniowi utleniacza doprowadzanego do komory przy spalaniu konwencjonalnym, w celu zapewnienia tej samej hydrodynamiki warstwy fluidalnej przy przejściu pomiędzy trybami pracy.

3.2. Wpływ uproszczenia geometrii na wyniki symulacji

Odzwiedlenie rzeczywistej geometrii kotła w modelu numerycznym nie jest możliwe z powodu dużej różnicy pomiędzy wymiarami charakteryzującymi geometrię a wielkością elementów dyskretyzujących przestrzeń (elementy siatki numerycznej). Uchwycenie szczegółów konstrukcyjnych wymaga zastosowania gęstszych podziałów siatki numerycznej, co znacząco wydłuża czas potrzebny na otrzymanie wyników. Często drobne szczegóły konstrukcyjne nie mają znaczącego wpływu na wynik obliczeń,

Analiza techniczna, %		Analiza elementarna, %	
Popiół	21,8	C	28,82
Woda	40,5	H	2,32
Części lotne	22,3	S	0,31
Koksik	15,4	N	0,29
		O	5,96

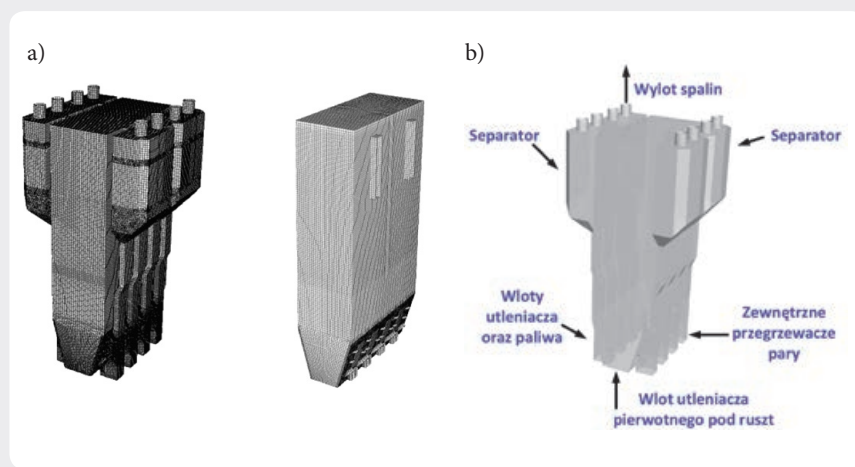
Tab. 1. Skład paliwa spalane go w kotle CFB Turów

	Węgiel	Materiał inerty
Gęstość, kg/m ³	1300	1800
Średnia średnica, μm	325	330
Max. średnica, μm	2000	1000
Min. średnica, μm	50	50
Parametr rozkładu	1,25	1,35
Liczba średnic	6	8

Tab. 2. Parametry rozkładu ziarnowego modelu Rosina-Rammlera

	AIR	OXY 1	OXY 2	OXY 3	OXY 4
Strumień węgla, kg/s	52,6				
Strumień utleniacza, kg/s	274,5				
X _{O₂,utl} , %	20,92	32,09	28,81	27,31	28,19
X _{CO₂,utl} , %	0,00	62,22	61,69	63,11	54,86
X _{H₂O,utl} , %	0,00	1,92	2,30	2,32	8,24
X _{N₂,utl} , %	78,93	3,77	7,21	7,26	8,71
Redukcja H ₂ O w rec. spalinach	70%			30%	
Temp. rec. materiału, °C	800-900				
Temp. utleniacza, °C	277				
Temp. węgla, °C	100				

Tab. 3. Analizowane przypadki oraz dane wejściowe do symulacji numerycznych



Rys. 1. Siatka numeryczna dla geometrii pełnej oraz uproszczonej (a), model geometryczny kotła (b)

więc powszechną praktyką jest uproszczenie modelu w celu przyspieszenia obliczeń oraz polepszenia zbieżności modelu numerycznego. W celu ograniczenia liczby elementów siatki numerycznej ściany parowacza zostały uproszczone do płaskich powierzchni, gdzie przewodzenie ciepła było rozwiązywane za pomocą modelu jednowymiarowego. Na ścianach została założona stała temperatura (357°C), grubość ścian oraz własności materiałowe. Co więcej, w modelu geometrycznym nie odwzorowano skomplikowanej geometrii rusztu, został on zastąpiony płaską powierzchnią, przez którą doprowadzana była część utleniacza pierwotnego.

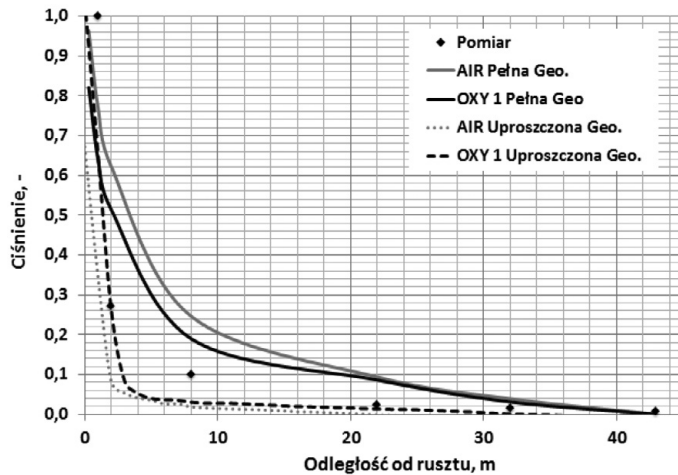
Dalsze uproszczenia geometrii polegają na rezygnacji z modelowania przepływu w układzie recyrkulacji kotła fluidalnego (separator, kanały opadowe, syfon). W pracy przeprowadzono analizę, w której porównano wpływ pominięcia modelowania przepływu w układzie recyrkulacji. Przeanalizowano dwa przypadki:

- model zawierający pełną geometrię komory spalania oraz układu recyrkulacji
- model uproszczony – komora spalania bez układu recyrkulacji.

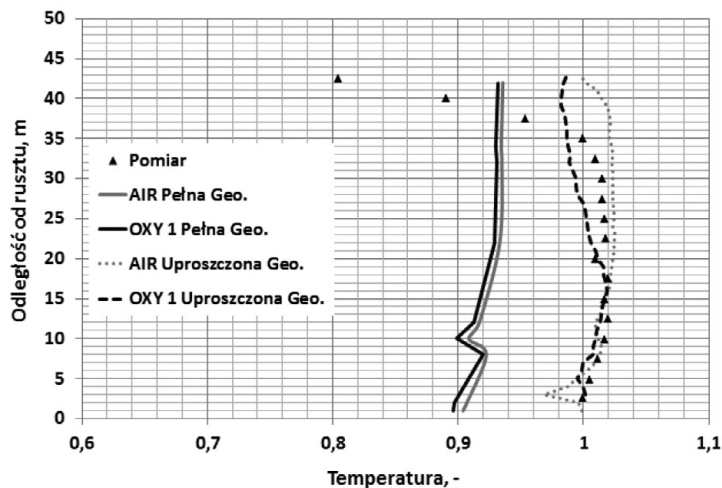
Siatki numeryczne stworzone dla pełnej oraz uproszczonej geometrii przedstawiono na rys. 1 (lewy). Siatka numeryczna używana w symulacjach numerycznych dla pełnego modelu zawierała 1,3 miliona elementów, podczas gdy dla modelu uproszczonego

liczba ta została zredukowana do 600 tysięcy elementów.

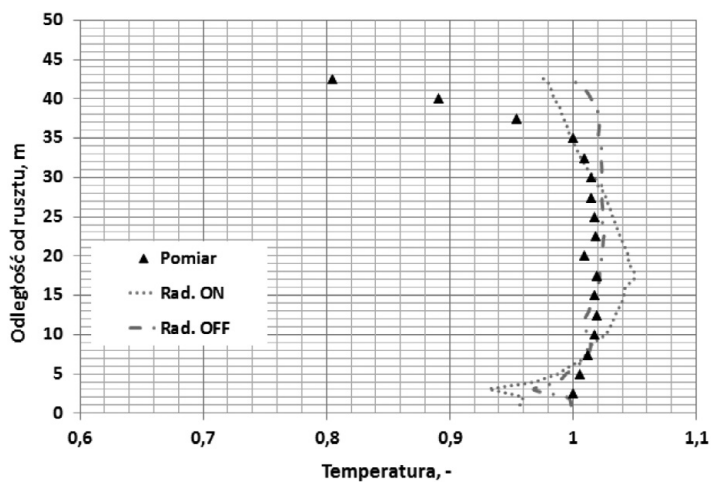
Ponieważ model uproszczony został ograniczony do komory spalania, recyrkulacja materiału odbywa się przy użyciu odpowiednich algorytmów zaimplementowanych do procedury obliczeniowej, wykorzystując zestaw funkcji użytkownika. W celu przeanalizowania wpływu uproszczeń modelu na obliczony profil ciśnienia oraz temperatury w komorze spalania, symulacje numeryczne zostały przeprowadzone z wykorzystaniem pełnego oraz uproszczonego modelu geometrycznego kotła. Obliczone profile ciśnienia wzdłuż wysokości komory spalania dla pełnego i uproszczonego modelu kotła zostały pokazane na rys. 2. Porównując wyniki symulacji numerycznych dla przypadku AIR oraz OXY 1, a także modelu pełnego oraz uproszczonego, uzyskano bardzo dobrą zgodność. Zestawiając poszczególne profile otrzymane z symulacji oraz dane pomiarowe, w szczególności profile temperatur, można zaobserwować stosunkowo dużą niezgodność dla przypadku modelu z pełną geometrią kotła. Na taką sytuację bezpośrednio wpływa ilość materiału transportowanego w komorze spalania. Dla pełnego modelu masa materiału jest znacznie wyższa w porównaniu z danymi pomiarowymi oraz z modelem uproszczonym, co można zaobserwować na rys. 3. Wraz ze wzrostem masy



Rys. 2. Profile ciśnienia w komorze spalania wyznaczone dla przypadku uwzględniającego uproszczoną oraz pełną geometrię kotła fluidalnego



Rys. 3. Profile temperatur w komorze spalania wyznaczone dla przypadku uwzględniającego uproszczoną oraz pełną geometrię kotła fluidalnego



Rys. 4. Profile temperatur w komorze spalania wyznaczone dla przypadku uwzględniającego wymianę ciepła na drodze radiacji oraz pomijającego jej wpływ

transportowanego materiału w komorze spalania wzrasta strumień ciepła przekazywanego do ścian kotła, a przez to spada temperatura w komorze spalania. Ustabilizowanie ilości materiału sypkiego w komorze dla modelu pełnego było bardzo trudnym zadaniem ze względu na wprowadzone uproszczenia w elementach geometrii układu nawrotnego. Uwzględnienie złożonej geometrii układu nawrotnego powinno znacznie poprawić dystrybucję materiału w modelu zawierającym pełną geometrię kotła fluidalnego, jednak będzie to miało znaczący wpływ na stabilność rozwiązywanych równań transportu oraz w znacznym stopniu wydłuży czas symulacji numerycznych. W trakcie symulacji pełnej geometrii kotła masa materiału transportowanego w komorze spalania wynosiła 170 ton, podczas gdy dla modelu uproszczonego była ona utrzymywana na poziomie 130 ton. Masa materiału w komorze spalania podczas obliczeń numerycznych była obliczana na podstawie profilu ciśnienia za pomocą równania manometrycznego.

3.3. Wpływ promieniowania ciepłego na wyniki symulacji

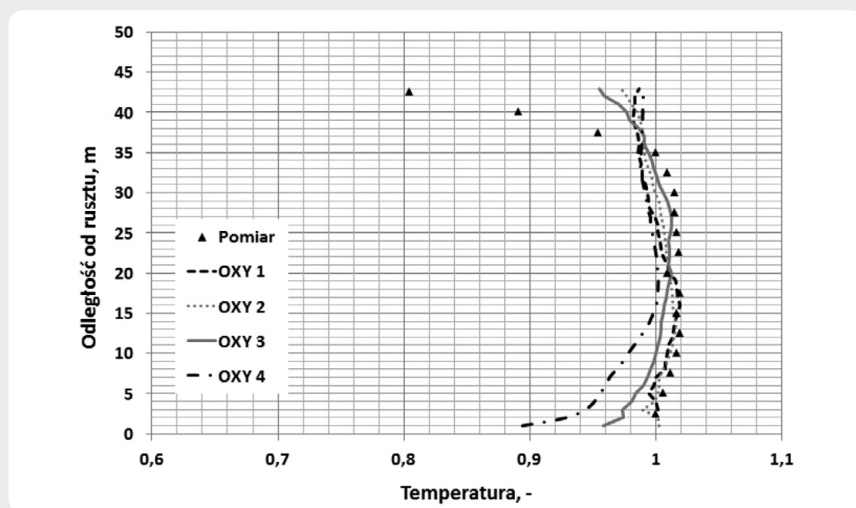
W ramach pracy przeanalizowano wpływ modelu opisującego promieniowanie ciepłe na otrzymywane profile temperatury w komorze spalania. Symulacje te zostały przeprowadzone wyłącznie dla spalania powietrznego (AIR), ze względu na bardzo długi czas obliczeń numerycznych w przypadku zastosowania zaawansowanego modelu do wyznaczania własności radiacyjnych gazów przy spalaniu tlenowym. Do modelowania radiacyjnej wymiany ciepła wykorzystywany był model Discrete Ordinates [15], w którym do obliczenia współczynnika absorpcji wykorzystywany był model Smitha [13].

Symulacje te miały na celu przebadanie wpływu radiacyjnej wymiany ciepła w komorze spalania kotła fluidalnego na obliczane profile temperatury. W przypadku modelowania procesu spalania w kotłach pyłowych, ze względu na niejednorodną i wysoką temperaturę panującą w komorze spalania, wpływ radiacji na wymianę ciepła nie może być pominięty. Taki stan rzeczy jest przeciwny do warunków panujących w komorze spalania kotła fluidalnego, gdzie temperatura utrzymywana jest na względnie niskim poziomie. Dodatkowo temperatura w komorze spalania kotła fluidalnego jest z reguły wyrównana, co w znacznym stopniu ogranicza efekt promieniowania na wymianę ciepła w komorze spalania. W kotłach CFB dominującymi mechanizmami przekazywania ciepła są przewodzenie i konwekcja. Powodowane jest to głównie dużymi udziałami objętościowymi fazy stałej, szczególnie w okolicach ścian kotła. Na bazie tych informacji pominięcie radiacyjnej wymiany ciepła w symulacjach numerycznych powinno być uzasadnione, jednakże w celu potwierdzenia tej hipotezy zostały przeprowadzone dwie symulacje numeryczne.

Otrzymane profile temperatur wzdłuż komory spalania dla symulacji z włączonym i wyłączonym modelem radiacji zostały porównane z danymi pomiarowymi, co zobrazowano na rys. 4. Na podstawie otrzymanych wyników można zaobserwować nieznaczne różnice pomiędzy modelem kotła fluidalnego, uwzględniającym efekt

	AIR	OXY 1	OXY 2	OXY 3	OXY 4
$X_{O_2,spa}$, %	2,7	5,8	2,8	1,7	2,71
$X_{CO_2,spa}$, %	13,6	67,1	68,9	70,1	64,8
$X_{H_2O,spa}$, %	14,6	21,6	21,3	21,6	25,7
$X_{N_2,spa}$, %	69,1	5,5	7,0	6,6	6,8

Tab. 4. Skład spalin na wylocie z komory spalania otrzymany dla różnych składów utleniacza



Rys. 5. Profile temperatur w komorze spalania wyznaczone dla różnych składów utleniacza

promieniowania, a modelem bez wymiany ciepła na drodze radiacji, co potwierdza mały wpływ promieniowania na całościową wymianę ciepła w kotle fluidalnym. Podobne obserwacje przedstawiono w pracy [6], gdzie symulowany był kocioł CFB o podobnej geometrii przy wykorzystaniu półempirycznego modelu kotła fluidalnego. Porównując wyniki symulacji numerycznych z danymi pomiarowymi, można dostrzec pewne różnice w dolnej oraz górnej części komory spalania, co jest spowodowane przyjętymi uproszczeniami w modelu geometrycznym kotła fluidalnego.

3.4. Wpływ składu utleniacza na wyniki symulacji

Seria symulacji numerycznych została przeprowadzona w celu przebadania wpływu różnych składów utleniacza na obliczony profil temperatury oraz skład spalin w komorze spalania kotła fluidalnego pracującego w technologii spalania tlenowego. W tab. 4 zestawiono wartości średniego składu spalin na wylocie z komory spalania kotła fluidalnego pracującego w technologii spalania tlenowego. Porównując otrzymany skład spalin, można dostrzec wyraźne różnice pomiędzy konwencjonalnym spalaniem w powietrzu oraz spalaniem tlenowym. Uzyskany skład spalin dla przypadków OXY 1–4 pozwala wstępnie oszacować potencjał możliwości zastosowania badanego kotła fluidalnego pracującego w trybie spalania tlenowego do technologii CCS. Symulacje numeryczne pozwoliły również na oszacowanie wpływu różnych składów utleniacza na obliczany profil temperatury w komorze spalania kotła fluidalnego, pracującego w technologii spalania

tlenowego. Wyznaczone profile temperatur zostały pokazane na rys. 5. Wyniki symulacji numerycznych były porównywane wyłącznie ze zmierzonym profilem temperatury uzyskanym dla kotła pracującego w trybie spalania powietrznego. Przeprowadzone symulacje numeryczne są jedynie hipotetyczne, mające na celu wyłącznie sprowadzenie termicznej odpowiedzi kotła przy zmianie składu utleniacza. Na podstawie otrzymanych profili dla przypadków spalania tlenowego (OXY) można stwierdzić, że odpowiedź termiczna kotła na zmianę utleniacza zbliża się do przypadku spalania powietrznego. Uzyskane profile temperatur dla przypadków OXY 1–3 różnią się jedynie w górnej części komory spalania. Dla przypadku OXY 4 różnice są także dostrzegalne w dolnym obszarze komory spalania (w pobliżu dysz), co spowodowane było zwiększeniem udziału pary wodnej w utleniaczu doprowadzanym do komory spalania.

4. Podsumowanie

W niniejszym artykule przedstawiono opracowanie modelu matematycznego, pozwalającego na symulację zjawisk przepływu ciepła, masy i pędu w kotle fluidalnym. Model ten zaimplementowano do komercyjnego kodu CFD Ansys Fluent, który został rozbudowany o odpowiednie funkcje użytkownika. Do modelowania złożonych procesów dynamiki złoża fluidalnego wykorzystano hybrydowy model Eulera-Lagrange’a, zwany także gęstym modelem fazy rozproszonej (ang. *Dense Discrete Phase Model* – DDPM). Przedstawione symulacje dotyczyły pracy kotła z cyrkulacyjną warstwą fluidalną

elektrowni Turów (Blok 4). Wyniki symulacji numerycznych zostały zestawione z danymi pomiarowymi uzyskanymi podczas pracy kotła przy spalaniu powietrznym. Otrzymane z modelu profile temperatur są zbliżone do wartości zmierzonych. Niewątpliwą wadą prezentowanego modelu jest długi czas obliczeń numerycznych, który często sięga nawet miesiąca, co może go eliminować z części bezpośrednich zastosowań inżynierskich.

Wyniki symulacji otrzymanych dla pełnej oraz uproszczonej geometrii ukazują możliwość redukcji czasu wymaganego na wykonanie obliczeń poprzez zredukowanie modelu geometrycznego do samej komory spalania. Układ recyrkulacji składający się z separatora, rury opadowej oraz syfonu zastąpiony jest wówczas odpowiednimi algorytmami pozwalającymi recyrkulować materiał złoża CFB. Otrzymane wyniki dla modelu uproszczonego, pomimo znacznych uproszczeń, wykazują dobrą zgodność z danymi pomiarowymi.

W ramach pracy przeanalizowano również wpływ modelu opisującego promieniowanie cieplne na profile temperatury w komorze spalania. Wyniki symulacji potwierdzają tezę o znaczącym wpływie mechanizmu przewodzenia i konwekcji na proces wymiany ciepła w kotle CFB, z uwagi na duże udziały objętościowe fazy stałej, szczególnie w okolicach ścian kotła. Otrzymane wyniki dla modelu uwzględniającego oraz nieuwzględniającego promieniowanie cieplne są porównywalne, co pozwala uzasadnić pominięcie radiacyjnej wymiany ciepła w symulacjach numerycznych kotłów CFB.

W pracy wykonano wiele symulacji numerycznych mających na celu oszacowanie wpływu różnych składów utleniacza na obliczony profil temperatury oraz skład spalin. Opracowany model komputerowy pozwala na analizowanie różnych trybów pracy kotła i może być niezwykle przydatny przy analizie możliwości adaptacji kotła CFB do spalania tlenowego, tzw. retrofitting.

Podziękowania

Praca została zrealizowana w ramach Strategicznego Programu Badań Naukowych i Prac Rozwojowych pt. „Zaawansowane technologie pozyskiwania energii, Zadanie Badawcze nr 2, Opracowanie technologii spalania tlenowego dla kotłów pyłowych i fluidalnych zintegrowanych z wychwytem CO₂”, dofinansowane przez NCBR, umowa nr SP/E/2/66420/10.

Bibliografia

- Adamczyk W.P. i in., Modeling oxy-fuel combustion in a 3D circulating fluidized bed using the hybrid Euler-Lagrange approach, *Applied Thermal Engineering* 2014(a), Vol. 71, s. 266–275.
- Adamczyk W.P. i in., Modeling of particle transport and combustion phenomena in a large-scale circulating fluidized bed boiler using a hybrid Euler-Lagrange approach, *Particology* 2014(b), Vol. 16, s. 29–40.
- Andrews M.J., O'Rourke P.J., The multifluid particle-in-cell (MP-PIC) method for dense particulate flows, *International Journal of Multiphase Flow* 1996, Vol. 22(2), s. 379–402.

4. BARRACUDA, 2004. CPFD Software: <http://cpfd-software.com>
5. Bałdyga J., Orciuch W., Krasiński A., Application of population balance to study complex particulate processes, *Czasopismo Techniczne* 2008, Vol. 105, s. 13–27.
6. Bordbar M., Myohanen K., Hyppanen T., Coupling of a radiative heat transfer model and a three-dimensional combustion model for a circulating fluidized bed furnace, *Applied Thermal Engineering*, 2014.
7. Chapman S., Cowling S., The mathematical theory of non-uniform gases, Cambridge: Cambridge Univ. Press 1970.
8. Chen L., Zheng S., Ghoniem A.F., Oxy-fuel combustion of pulverized coal: characterization, fundamentals, stabilization and CFD modeling, *Progress in Energy and Combustion Science*, 2012, s. 156–214.
9. Crowe C.T., Schwarzkopf J.D., Sommerfeld M., Tsuji Y., Multiphase flows with droplets and particles, Taylor & Francis Group, 2012.
10. Czakiert T. i in., Oxy-fuel circulating fluidized bed combustion in a small pilot-scale test rig, *Fuel Processing Technology* 2010, Vol. 91 Issue 11, s. 1617–1623
11. Edge P. i in., Combustion modelling opportunities and challenges for oxy-coal carbon capture technology, *Chemical Engineering Research and Design* 2011, Vol. 89, Issue 9, s. 1470–1493.
12. Gidaspow D., Multiphase Flow and Fluidization, Boston MA., Academic Press 1994.
13. Johansson R. i in., Account for variations in the H₂O to CO₂ molar ratio when modelling gaseous radiative heat transfer with the weighted-sum-of-grey-gases model, *Combustion and Flame*, 2011, s. 893–901.
14. Jovanovic R. i in., Numerical investigation of influence of homogeneous heterogeneous ignition/combustion mechanisms on ignition point position during pulverized coal combustion in oxygen enriched and recycled flue gases atmosphere, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 2011, Vol. 54, s. 921–931.
15. Krishnamoorthy G., A new weighted-sum-of-gray-gases model for CO₂-H₂O gas mixtures, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 2010, s. 1182–1186.
16. Magnussen B.F., Hjertager B.H., On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion, In 16th Symp. on Combustion 1976.
17. Mazzei L., Marchisio D.L., Lettier P., Direct quadrature method of moments for mixing of inert poly-disperse fluidized powders and the role of numerical diffusion, *Industrial & Engineering Chemistry Research* 2003, Vol. 49(11), s. 5141–5152.
18. Myohanen K., Hyppanen T., A three-dimensional model frame for modelling combustion and gasification in circulating fluidized bed furnaces, *International Journal of Chemical Reactor Engineering* 2011, Vol. 9(A15), s. 55.
19. Snider D., Banerjee S., Heterogeneous gas chemistry in the CPFD Eulerian-Lagrangian numerical scheme (ozone decomposition), *Powder Technol* 2010, Vol. 199, s. 100–106.
20. Snider D.M., O'Rourke P.J., Andrews M.J., Sediment flow in inclined vessels calculated using a multiphase particle-in-cell model for dense particle flows, *International Journal of Multiphase Flow* 1998, Vol. 24, s. 1359–1382.
21. Syamlal M., Rogers W., O'Brien T.J., MFIX Documentation, National Technical Information Service 1993.
22. Wischniewski R. i in., Reactive gas-solids flows in large volumes 3D modeling of industrial circulating fluidized bed combustors, *Particuology* 2010, Vol. 8(1), s. 67–77.
23. Zhang N. i in., 3D CFD simulation of hydrodynamics of a 150MWe circulating fluidized bed boiler, *Chemical Engineering Journal* 2010, Vol. 162, s. 821–28.

Wojciech Adamczyk

dr inż.

Politechnika Śląska

e-mail: wojciech.adamczyk@polsl.pl

Ukończył studia na Wydziale Inżynierii Środowiska i Energetyki Politechniki Śląskiej (2009). Tytuł doktora uzyskał na Wydziale Inżynierii Środowiska i Energetyki (2014). Od 2014 roku pracuje jako adiunkt w Instytucie Techniki Ciepłej. Obszar jego zainteresowań to modelowanie procesu wymiany ciepła, masy oraz pędu w kotłach pyłowych i fluidalnych, modelowanie przepływu krwi w wybranych częściach układu krwionośnego człowieka, nieniszczące badania dyfuzyjności cieplnej z wykorzystaniem metod odwrotnych.