2D CFD NUMERIČKA SIMULACIJA FLUIDIZACIONE KOMORE SAGOREVANJA BAZIRANE NA EULER-EULER GRANULARNOM MODELU

2D FLUIDIZED COMBUSTION CHAMBER CFD SIMULATION BASED ON EULER-EULER GRANULAR FLOW MODEL

Stevan NEMODA, Milica MLADENović, Milijana PAPRIKA,
Branislav REPIĆ, Ana MARINKOVIĆ

Institut za nuklearne nauke „Vinča“ Univerziteta u Beogradu, Beograd
snemoda@vin.bg.ac.rs

U radu je predložen dvodimenzijски model numeričke simulacije sagorevanja tečnih goriva u fluidizovanom sloju, koji se zasniva na dvo fluidnom Euler – Euler pristupom modeliranja fluidizovanog sloja uz određivanje polja brzina gasa i čestica u dvofaznim, granularnim tokovima zasnovane na analogiji sa kinetičkom teorijom gasova (KTGF). Sveobuhvatan model kompleksnih procesa u fluidizacionoj komori sagorevanja podrazumeva, pored određivanja polja brzina gasne i čestične faze, inkorporiranje energetskih jednačina gasne i čestične faze, kao i transportnih jednačina hemijskih komponenti sa izvornim članovima usled konverzije komponentata. Brojni numerički eksperimenti pokazuju da je izbor koeficijenata u izrazima za sile trenja prilikom interakcije faza ima izuzetan značaj i mora se sprovesti za svaki, značajno različit režim fluidizacije, posebno. Urađene su serije numeričkih eksperimenata sa simulacijom procesa sagorevanja u FS sa i bez značajnog sadržaja vode u gorivu. Proračuni su nestacionarni, a modelirani vremenski period odgovara vremenu za koje gas prođe kroz celu visinu reaktora. Numerički eksperimenti, na osnovu predloženog matematičkog modela, su takođe korišćeni za potrebe analize uticaja različitih snaga pri kojima radi reaktor, kao i različitih stepena fluidizacije, na efikasnost sagorevanja kao i na profile temperatura u zoni sagorevanja.

Ključne reči: CFD modeliranje; sagorevanje; fluidizovani sloj, granularni tok, tečna goriva,

A comprehensive 2D numerical model of the bubbled fluidized bed with combustion of liquid fuels is proposed in the paper. The proposed numerical model is based on the Eulerian–Eulerian granular flow modeling with the kinetic theory of granular flow. The model includes the following basic governing equations: the continuity equations of the solid and gas phase, the momentum conservation equations of the gas and solid phase, the energy equations of gas, and the solid phase and conservation equations for chemical components. The choice of the semi empirical constants of the inter-phase interaction drag force model is significant and these constants must be adjusted for each particular regime of fluidization. Presented numerical experiments primarily were applied to verification of the assumptions about the impact of water content in a liquid fuel on FB combustion intensity. The numerical experiments, based on the proposed mathematical model, also have been used for the purposes of analyzing the impacts of various reactor powers as well as fluidization numbers, on the combustion efficiency and on combustion zone temperature fields.

Key words: CFD model, combustion, liquid fuel, bubbling fluidized bed, Euler-Euler approach, three phase flow

1 Uvod

Reaktori na bazi mehurastog gas-čvrste čestice fluidizovanog sloja (FS) se koriste u mnogim industrijskim operacijama, kao što su proizvodnja energije i petrohemijski procesi. U poslednje vreme ovi reaktori se sve češće primenjuju za potrebe termičke dezintegracije (insineracije) nepotrebnih i otpadnih industrijskih produkata. Prednosti sagorevanja nekonvencionalnih goriva (sa visokim sadržajem vode i drugih balastnih materija) u fluidizovanom sloju su višestruke. Kao prvo, veliki toplotni kapacitet sloja, toplotna provodnost i intenzivan prenos toplote između čestica inertnog materijala i goriva omogućavaju stabilan proces sagorevanja širokog opsega nekonvencionalnih goriva, uz veoma malu osetljivost na promene kvaliteta goriva. Zona intenzivnog sagorevanja zauzima relativno malu zapreminu, jer veći deo goriva sagoreva u samom sloju uz dogorevanje manjeg dela u „splash“ zoni

iznad sloja. Pored toga, fluidizaciono ložište može da radi na nižim temperaturama (≈ 850 C) koje su optimalne sa aspekta smanjene koncentracije NO_x jedinjenja u dimnim gasovima. Takođe, ova ložišta su povoljna i sa aspekta efikasnosti odsumporavanja krečnjakom u samom ložištu [1], kada je to neophodno. Zbog svega navedenog ova tehnologija je preporučena od strane EU za sagorevanje otpadnih materija.

Za potrebe razvoja tehnologije za spaljivanje (insineracije) taloga iz rezervoara sirove nafte, kao i drugih otpadnih materija sa karakteristikama niskokaloričnih goriva, na ekološki prihvatljiv način u Institutu VINČA - Laboratorija za termotehniku i energetiku, obavljaju se istraživanja na razvoju tehnologije za sagorevanje nekonvencionalnih čvrstih i tečnih goriva, odnosno otpadnih industrijskih materija, u fluidizacionom ložištu. U tom cilju urađene su serije merenja na poluindustrijskoj eksperimentalnoj instalaciji sa fluidizovanim slojem (FS) za sagorevanje teškog tečnog goriva, kao i na demonstraciono-eksperimentalnom toplovodnom kotlu (snage oko 300 kW) sa fluidizacionim ložištem.

Uporedo sa eksperimentalnim metodama sve češće se primenjuje numerička simulacija za potrebe razvojnog istraživanja u oblasti energetike i procesne tehnike. Numerički modeli pružaju velike mogućnosti kod uštede sredstava i vremena prilikom razvoja postrojenja i tehnologija na ovom polju. Ipak, treba imati u vidu da numerički alati za simulaciju složenih procesa procesa, kao što su sagorevanje u fluidizovanom sloju, nisu u potpunosti razvijeni zbog poteškoća prilikom opisivanja relativno složenog dvofaznog strujanja i specifičnosti u procesima prenosa toplote i mase, zastupljenih kod mehuraste gas-čestice fluidizacije. Pored toga, mnogi od postojećih numeričkih postupaka nisu prilagođeni inženjerskim potrebama jer su relativno složeni i zahtevaju skupu računarsku opremu, pa nisu pogodni za razvojnu i inženjersku primenu.

U literaturi se mogu izdvojiti dva osnovna pristupa modeliranju gas – čestice dvofaznih tokova. Jedan od njih je Lagrangian–Eulerian pristup, koji se često zove i modeliranje posebnih čestica (discrete particle modeling - DPM) i kod koga se rešavaju jednačine kretanja posebnih čestica, odnosno paketa čestica (parcel) sa istim karakteristikama. Pri tome se kontinualna (gasna) faza modelira u skladu sa Euler-ovskim pristupom, dok se trajektorije čestica simuliraju prema Lagrange-ovskom principu [2-4]. Za velike i složene dvofazne sisteme, kao što je fluidizovani sloj. Lagrangian–Eulerian pristup zahteva veoma moćne kompjuterske resurse, zbog velikog broja jednačina koje se rešavaju.

Drugi pristup modeliranju gas – čestice dvofaznih tokova je tzv. dvo-fluidni Euler–Euler pristup modeliranju [5-8]. Kod ovog postupka, koji se često označava kao modeliranje granularnog toka (granular flow model - GFM), osnovna pretpostavka je da se obe faze (čestična i fazna) posmatraju kao dva odvojena fluida uz modeliranje sila otpora, kako između faza, tako i u okviru čestične faze. Čestice u granularnom toku se mogu posmatrati po analogiji sa kretanjem molekula u gasu, što je primenjeno kod dvo-fluidnog modeliranja dvofaznih tokova, pa je u skladu sa time razvijena kinetička teorija granularnog toka (kinetic theory of granular flow - KTGF). Kod ove teorije granularnih tokova figuriše tzv. granularna temperatura, koja je mera stohastičkih oscilacija čestica predstavlja reprezent specifične kinetičke energije fluktuacija brzina čestica oko srednje vrednosti njihovih brzina. Detaljan opis KTGF matematičkog modeliranja se može naći u [9].

Iako se koristi detaljan matematički model za opisivanje kompleksnih procesa u FS, određivanje sila otpora u dvo-fluidnim modelima je u osnovi semiempirijsko. Shodno tome, neophodno je primeniti model otpora, koji korektno uzima u obzir uslove minimalne brzine fluidizacije, kada se čestice nalaze u stanju suspenzije kao rezultat ravnoteže interfaznih i zapreminskih sila. U tom cilju se često primenjuje Syamlal-O'Brien-ov model sila otpora prilikom interfazne interakcije [10] gde koeficijent otpora između fluida i čestične faze zavisi samo od poroznosti (udela gasne faze), ali ne i od karakteristika fluidizacije.

U radu je ispitivan uticaj konstanti modela sila otpora usled interfazne interakcije za različite režime fluidizacije, pri čemu su menjani intenzitet fluidizacije, geometrija reaktora, veličina i materijal čestica, multi-komponentni i temperaturski uslovi fluida. Rezultati istraživanja takođe obuhvataju numeričke eksperimente različitih režima sagorevanja tečnog goriva u fluidizovanom sloju ložišta za sagorevanje nekonvencionalnih tečnih goriva. Pored toga, posebna pažnja je posvećena uticaju sadržaja vode u gorivu na položaj zone intenzivnog sagorevanja. Takođe su izvedeni numerički eksperimenti u cilju analize uticaja različitih snaga pri kojima radi reaktor, kao i različitih stepena fluidizacije, na efikasnost sagorevanja kao i na profile temperatura u zoni sagorevanja.

2 Euler-Euler granularni model fluidizovanog sloja

Euler-Euler pristup modeliranja fluidizovanog sloja pretpostavlja da se gas i gusta faza FS (sistem gas-čestice pri uslovima minimalne fluidizacije) posmatraju kao dva fluida sa različitim karakteristikama. U transportnim jednačinama prenosa količine kretanja efektivnog fluida, koji predstavlja gustu fazu FS, modelira se interakcija fluid-čestice pri uslovima minimalne brzine fluidizacije, kao i interakcija između samih čestica. Pritisak je isti za sve faze pri čemu se usvaja pritisak kontinualne faze. Momentna jednačina i jednačina kontinuiteta se rešava za svaku fazu, pri čemu se za granularnu fazu računaju granularna temperatura (fluktuirajuća energija čestica) kao i viskoznost usled napona smicanja i zapreminska viskoznost, koji se određuju primenom kinetičke teorije gasova na granularno strujanje. Takođe je potrebno definisati koeficijente za računanje otpora međufaznog strujanja.

Za modeliranje interakcija između gasne i čestične faze, u okviru predloženog Euler-Euler granularnog pristupa modeliranju fluidizovanog sloja, primenjene su rutine sadržane u modulima komercijalnog CFD programskog paketa FLUENT 6.3.26. Ovaj kod dozvoljava prisustvo više faza u okviru jedne kontrolne zapremine numeričke mreže, uvodeći pojam zapreminskog udela svake faze. Čvrsta faza predstavlja granularni sloj sačinjen od sfernih čestica, uniformnog prečnika. Jednačine održanja mase i količine kretanja se rešavaju za svaku fazu posebno.

Osnovne i konstitutivne jednačine dvofluidnog granularnog modela fluidizovanog sloja se mogu predstaviti sledećim setom izraza [11]:

$$\begin{array}{l} \text{Jednačina kontinuiteta gasne faze} \end{array} \quad \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{u}_g) = 0 \quad (1)$$

$$\begin{array}{l} \text{Jednačina kontinuiteta čvrste faze} \end{array} \quad \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{u}_s) = 0 \quad (2)$$

$$\begin{array}{l} \text{Zakon održanja količine kretanja gasne faze} \end{array} \quad \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \vec{u}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{u}_g \vec{u}_g) = -\alpha_g \nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_g + \alpha_g \rho_g \vec{g} + K_{gs} (\vec{u}_g - \vec{u}_s) \quad (3)$$

$$\begin{array}{l} \text{Zakon održanja količine kretanja čvrste faze} \end{array} \quad \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \vec{u}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{u}_s \vec{u}_s) = -\alpha_s \nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_s + \alpha_s \rho_s \vec{g} + K_{gs} (\vec{u}_g - \vec{u}_s) \quad (4)$$

Pri čemu su tenzori napona gasne i granularne faze, respektivno:

$$\bar{\bar{\tau}}_g = 2\mu_g \bar{S}_g + (\lambda_g - \frac{2}{3}\mu_g) \nabla \cdot \vec{u}_g \bar{I}$$

$$\bar{\bar{\tau}}_s = -p_s \bar{I} + 2\alpha_s \mu_s \bar{S}_s + \alpha_s (\lambda_s - \frac{2}{3}\mu_s) \nabla \cdot \vec{u}_s \bar{I},$$

gde je:

$$\bar{S}_k = \frac{1}{2} (\nabla \vec{u}_k + (\nabla \vec{u}_k)^T), \quad k = g, s \text{ - tenzor brzina deformacije, } p_s = 2\rho_s \Theta_s (1 + e_s) \alpha_s^2 g_{0s} \text{ - pritisak}$$

granularne faze [12], g_{0s} - funkcija radijalne distribucije $g_o(\alpha_s) = \frac{1}{1 - \alpha_s} + \frac{3\alpha_s}{2(1 - \alpha_s)^2}$, e_s - koeficijent restitucije.

Zapreminska viskoznost λ_s je mera otpora čvrste čestice ekspanziji odnosno kompresiji i prema

$$\text{Lun et al. modelu [13] se definiše kao: } \lambda_s = \frac{4}{3} \alpha_s \rho_s d_s g_{os} (1 + e_s) \left(\frac{\Theta_s}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Viskoznost granularne faze sastoji se od smicajne μ_s i zapreminske viskoznosti λ_s . Smicajna viskoznost je posledica translatornog kretanja (kinetička viskoznost $\mu_{s,kin}$), međusobnog sudaranja čestica (koliziorna viskoznost $\mu_{s,coll}$) i frikcione viskoznosti ($\mu_{s,fr}$): $\mu_s = \mu_{s,kin} + \mu_{s,coll} + \mu_{s,fr}$.

Prema Syamlal-ovom modelu [12] kinetička viskoznost je:

$$\mu_{s,kin} = \frac{\alpha_s d_s \rho_s (\Theta_s \pi)^{\frac{1}{2}}}{12(2 - \eta)} \left[1 + \frac{8}{5} \eta (3\eta - 2) \alpha_s g_{0s} \right], \quad \eta = \frac{(1 + \alpha_s)}{2},$$

a za kolizionu viskoznost važi sledeći izraz: $\mu_{s, coll} = \frac{8}{5} \alpha_s \rho_s d_s g_{os} \eta \left(\frac{\Theta_s}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}}$. Prema Schaeffer-

ovom modelu [14] se može definisati frikciona viskoznost: $\mu_{s, fr} = \frac{p_s \sin \phi}{2\sqrt{I_{2D}}}$, gde je p_s - pritisak granu-

larne faze, ϕ – unutrašnji ugao trenja, I_{2D} - druga invarijanta devijatorskog dela tenzora napona.

Poslednji član u jednačinama (3 i 4) je posledica sile otpora interfazne interakcije, pri čemu koeficijent otpora između fluida i čvrste (granularne) faze, prema Syamlal-O'Brien modelu [10], glasi:

$$K_{gs} = \frac{3\alpha_g \alpha_s \rho_g}{4u_{r,s}^2 d_s} C_D |\vec{u}_s - \vec{u}_g|, \quad C_D = \left(0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{\text{Re}_s / u_{r,s}}} \right)^2, \quad \text{Re}_s = \frac{\rho_g d_s |\vec{u}_s - \vec{u}_g|}{\mu_g}$$

$u_{r,s}$ je brzina pri kojoj čestica lebdi u fluidizovanom sloju:

$$u_{r,s} = 0.5 \left(A - 0.06 \text{Re}_s + \sqrt{(0.06 \text{Re}_s)^2 + 0.12 \text{Re}_s (2B - A) + A^2} \right)$$

$$A = \alpha_g^{4.14}, \quad B = \begin{cases} = 0.8 \alpha_g^{1.28} & \text{za } \alpha_g \leq 0.85 \\ = \alpha_g^{2.65} & \text{za } \alpha_g > 0.85 \end{cases}$$

Granularna temperatura polazeći od jednačina konzervacije fluktuirajuće granularne energije glasi:

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho_s \alpha_s \Theta_s) + \nabla (\rho_s \alpha_s \vec{u}_s \Theta_s) \right] = \left(-\rho_s \bar{I} + \bar{\tau} \right)_s : \nabla \vec{u}_s + \nabla (k_{\Theta_s} \nabla \Theta_s) - \gamma_{\Theta_s} + \phi_{gs}$$

Koeficijent difuzije ili konduktivnost granularne temperature je prema Syamlal-u [12]:

$$\kappa_{\Theta_s} = \frac{15\alpha_s \rho_s d_s \sqrt{\Theta_s \pi}}{4(41 - 33\eta)} \left[1 + \frac{12}{5} \alpha_s g_{os} \eta^2 (4\eta - 3) \right].$$

Disipaciju granularne energije usled neelastičnih sudara čestica Lun et al. [13] definišu na sledeći način: $\gamma_{\Theta_s} = \frac{12(1 - e_s) g_{os}}{d_s \sqrt{\pi}} \rho_s \alpha_s \Theta_s^{\frac{3}{2}}$. Razmena kinetičke energije između faza se određuje preko:

$$\phi_{gs} = -3K_{gs} \Theta_s.$$

3 Numerička simulacija fluidizacionog reaktora pri različitim režimima fluidizacije

Numerički eksperimenti sa simulacijom mehurastog FS, izvedeni u okviru ovog rada, pokazuju da je izbor konstanti koeficijenta B u jednačinama Syamlal-O'Brien-ovog modela sila otpora prilikom interfazne interakcije, u okviru dvofluidnog postupka matematičkog modela granularnih tokova, od velikog značaja na rezultat predviđanja tokova obe faze i formiranja mehurova. U tom cilju obavljen je niz numeričkih simulacija 2D fluidizacionog reaktora sa različitim veličinama i gustinama čestica, kao i pri različitim temperaturama i sastavom gasne faze.

Numeričko rešavanje osnovnih jednačina Fluentovog Euler-Euler granularnog modela (jedm. 1-4), se takođe obavlja primenom metode kontrolnih zapremina, pri čemu se međusobni uticaj i korekcija brzina i pritiska obavlja postupkom za višefazno strujanje primenom Phase Coupled SIMPLE (PCSIMPLE) algoritma. Diskretizacija konvektivnih članova se obavlja po uzvodnoj šemi drugog reda.

Proračuni su nestacionarni sa vremenskim korakom od 1 ms, koji je omogućio relativno brzu konvergenciju sa maksimum 100 iteracija po jednom vremenskom koraku, pri čemu konvergentni kriterijum iznosi $1 \cdot 10^{-3}$. Broj vremenskih koraka, odnosno ukupno vreme simulacije, je određivano na osnovu vremena potrebnog za prolazak fluida kroz celokupnu visinu komore sagorevanja. Numerička mreža se sastoji od preko 13000 čvorova.

Model sila otpora prilikom interfazne interakcije je inkorporiran u set jednačina celokupnog modela granularnog toka ugradnjom specijalizovanih potprograma u "C"-jeziku ("user defined functions"), kojima korisnik može nadograditi pojedine delove Fluentovog programskog koda.

Predloženi CFD model fluidizovanog sloja je primenjen na tri režima fluidizacionog reaktora, čije su osnovne karakteristike prikazane u Tabeli 1. Pri tome je za sva tri režima stepen fluidizacije je imao vrednost približno 3. Vrednosti konstanti 0.8 i 2.65 koeficijenta B osnovnog Syamlal-O'Brien-ovog modela sila otpora su adaptirane da bi se što realnije simulirale karakteristike razmatranih fluidizacionih režima. U skladu sa time, ove konstante su za režim 1 bile 0.281632 i 9.07696 respektivno, a za režime 2 i 3 3.2 i 0.6625, respektivno.

Tabela 1. Režimi fluidizacije

Režim	Dimenzije reaktora [m]	Visina FS [m]	Prečnik čestica [mm]	Gustina čestica [kg/m ³]	Sastav gasa za fluidizaciju	Ulazna brzina gasa za fluidizaciju [m/s]	Temperatura [K]
1	1×0.15	0.15	0.3	2600	vazduh	0.25	300
2	0.23×0.4	0.3	0.8	2400	vazduh	1	300
3	0.23×0.4	0.3	0.8	2400	Vazduh (O ₂ +N ₂)	1	1200

Rezultati numeričkih simulacija sva tri režima dati su na slikama 1 – 3, koje prikazuju distribuciju zapreminskog udela čestične faze (α_s) u različitim fazama razvoja mehurastog fluidizovanog sloja.

Slika 1. Razvoj polja zapreminskog udela čestične faze kod režima fluidizacije 1, 2 i 3 (odozgo nadole).

4 2D simulacija sagorevanja tečnog goriva in u fluidizacionoj komori sagorevanja

Sveobuhvatan model kompleksnih procesa u fluidizacionom ložištu se može formirati nadgradnjom predloženog dvo-fluidnog modela FB (pogl. 2.), u koji se moraju uvrstiti energetske jednačine za obe faze kao i transportne jednačine održanja hemijskih vrsta, sa izvornim članom usled konverzije hemijskih komponenata. Dodatni set jednačina, koje upotpunjuju model sagorevanja u FS, predstavljen je izrazima (5-7):

$$\begin{aligned}
 \text{Energetska} & \quad \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g c_{p,g} T_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{u}_g c_{p,g} T_g) = \nabla \cdot \left(\frac{k_t}{c_{p,g}} \nabla T_g \right) \\
 \text{jednačina} & \\
 \text{gasne faze} & \quad + \nabla \cdot \left(\sum_i \alpha_g \rho_g D_{i,m} c_{p,i} T_g \nabla Y_i \right) - h(T_s - T_g)
 \end{aligned} \tag{5}$$

Energetska
jednačina
čestične faze

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s c_{p,s} T_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{u}_s c_{p,s} T_s) = \nabla \cdot \left(\frac{k_s}{c_{p,s}} \nabla T_s \right) + h(T_s - T_g) \quad (6)$$

Jednačine održanja hemijskih komponenti

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g Y_i) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{u}_g Y_i) = \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g D_{i,m} \nabla Y_i) + R_i \quad (7)$$

Za razmenu toplote između faza (poslednji član u jednačinama 5 i 6) primenjen je zapreminski koeficijent prelaza toplote, koji je definisan u radu [15]. Koeficijent toplotne provodljivosti granularne (čestične) faze određivan je na osnovu Syamlal i Gidaspow formulacije [16]. Ovde treba napomenuti da je na rezultat numeričkih eksperimenata u velikoj meri uticao izbor efektivnog koeficijenta toplotne provodljivosti smeše gasne i granularne faze.

Izvorni član R_i u jednačini (7) brzini konverzije hemijske komponente i . Izvorni član jedn. (7), koji sadrži brzinu hemijske reakcije komponente i , može se definisati, primenom Arrhenius-ovog izraza za konstantu brzine reakcije, na sledeći način:

$$R_i = k_{o,i} \exp\left(-\frac{E_{a,i}}{RT_g}\right) [Y_i]^{a_1} [Y_j]^{a_2} \quad (8)$$

Pošto je prezentovani rad sastavni deo obimnih istraživanja sagorevanja nekonvencionalnih goriva i otpadnih industrijskih materijala, kao gorivo u obrađenim numeričkim eksperimentima korišćeno je dizel gorivo ($C_{10}H_{22}$) sa visokim sadržajem vode, kao neka vrsta model – goriva, koje reprezentuje otpadne sagorive tečne materije iz industrije.

Lista reakcija, zajedno sa konstantama izraza za brzinu reakcije, koje figurišu u izvornim članovima seta jednačina (7) održanja hemijskih komponenti, je prikazana u Tabeli 2. Tabela sadrži dve reakcije koje nisu striktno hemijske, jer definišu brzinu devolatilizacije goriva i generisanje vodene pare iz vode u gorivu. Početne vrednosti koeficijenta reakcija iz Tabele 2. su preuzete iz [17, 18].

Tabela 2. Lista hemijskih reakcija.

Reakcija		Preeksponencijalni koeficijent k_o	Energija aktivacije E_a [J/kmol]	Red reakcije prvog reaktanta a_1	Red reakcije drugog reaktanta a_2
Broj	Formula				
1	$C_{10}H_{22} \text{ (liquid)} \rightarrow C_{10}H_{22} \text{ (vapour)}$	11.2	1.7E6	1	-
2	$C_{10}H_{22} + 10.5 O_2 = 10 CO + 11 H_2O$	2.587e+10	1.256e+08	0.25	1.5
3	$CO + 0.5 O_2 = CO_2$	1.0E12	1.0E8	1	1
4	$H_2O \text{ (liquid)} \rightarrow H_2O \text{ (vapour)}$	22.39	1.7E6	1	-

Treba naglasiti da se ovde radi o kvazi trofaznom sistemu: tečna voda, gasovi sa vodenom parom i čestice, pri čemu se uzima da gorivo trenutno ispari. Praktično se gorivo na izlazu iz mlaznice posmatra kao smeša tečne vode i gasovitih isparljivih komponenata. Numerički sistem nije stvarno trofazan jer se koriste jednačine samo za dve faze: fluidnu, koju čine tečna voda sa gasovima (vodena para, isparljive i vazduh) i čestitičnu, koju čini granularni sloj čestica.

4.1 Rezultati numeričke simulacije sagorevanja tečnog goriva u fluidizacionom reaktoru

Obrađeni numerički eksperimenti sa sagorevanjem tečnog goriva u FS u okviru prvih istraživanja izvedeni su u cilju ispitivanja efekata uticaja sadržaja vode u tečnom gorivu na kinetiku sagorevanja u FS.

U okviru eksperimenata u pilot ložištu Laboratorije za termotehniku i energetiku (Institut VINČA) sa doziranjem tečnog goriva u FS, uočeno je povlačenje zona intenzivnog sagorevanja ka oblastima

dublje ispod površine sloja prilikom sagorevanja tečnog goriva sa značajnim sadržajem vode, u odnosu na gorivo bez sadržaja vlage [19, 20]. Na osnovu ovakvih rezultata eksperimenata može se zaključiti da voda u gorivu povećava globalnu brzinu reakcije sagorevanja u ložištu sa FS, u kome se gorivo dozira bočno u sloj. Ova pojava je skopčana sa naglim prelaskom vode u parno stanje prilikom ulaska u zagrejan FS ($\approx 900\text{C}$), što izaziva proširenje ulaznog mlaza i bolje mešanje goriva sa oksidatorom (vazduhom), kao i razbijanje tečnog (još neisparenog) goriva na sitne kapi i povećanje površine dodira goriva sa okolinom. Ovaj efekat je primećen i kod lako i teže isparljivih tečnih goriva, pri čemu kod lako isparljivih goriva efekat boljeg mešanja volatila goriva sa oksidatorom, usled naglog prelaska vode u parno stanje i proširenja ulaznog mlaza, ima izraženiji uticaj od efekta razbijanja tečnog goriva na sitne kapi. U radu su prikazani rezultati numeričkih eksperimenata, obavljenih primenom Fluentovog granularnog modela FS, u cilju potvrde pretpostavke o efektu boljeg mešanja volatila goriva sa oksidatorom kada se lako isparljivo gorivo, koje sadrži znatnu količinu vlage, dozira u fluidizaciono ložište. Prvi pokušaji numeričke simulacije navedenog fenomena su objavljeni u radu [21].

Šematski prikaz geometrije numerički simuliranog fluidizacionog reaktora je data na slici 4, pri čemu su visina i širina reaktora sa fluidizovanim slojem iznosile 2.3m i 0.4m, respektivno. Modeliran granularni sloj se sastoji od čestica prečnika 0.8 mm i gustine 2600kg/m^3 , visina sloja u nasutom stanju je 0.3m.

Gorivo se dozira kroz vertikalnu mlaznicu, visine 0.05 m, postavljene aksijalno na dnu reaktora. Vazduh je doziran anularno, kao što je to prikazano na slici 4. Ulazna temperatura goriva i vazduha je bila ambijentalna (300 K).

Kao što je već napomenuto, test gorivo je bio dizel sa različitim sadržajem vode. Predstavljeni numerički eksperimenti su obavljeni sa 0.0, 0.1, 0.2, 0.3 i 0.4 masenih udela vode u gorivu. Ulazni maseni protok vazduha i čistog dizela je bio 0.11627 kg/s i 0.002586 kg/s respektivno kod svih proračuni, što odgovara koeficijentu viška vazduha od $\lambda_v=3$. U slučajevima kada je gorivo sadržavalo od 0.1 to 0.4 masenih udela vode ukupni ulazni maseni protok goriva je bio: 0.00287 , 0.00323 , 0.00370 i 0.00431 kg/s . Postupak proračuna numeričke simulacije FS, kao i numerički metod, primenjeni su u skladu sa procedurom opisanom u poglavlju 3. Numerička mreža, čija je skica prikazana na slici 4., sastoji se od 13130 čvorova, pri čemu je 3430 čvorova smešteno u zonu nasutog sloja čestica.

Proračunska procedura se sastoji od dva koraka, pri čemu se u prvom koraku formiraju parametre razvijenog fluidizovanog sloja, zagrejanog na temperaturu od 1200 K , u skladu sa proračunima prikazanim u poglavlju 3. (slika 1.). Polja vrednosti varijabli, izračunatih u prvom koraku simulacije, upotrebljena su kao inicijalni uslovi za drugi korak proračuna. Pored toga, u drugom proračunskom koraku izmenjeni su granični uslovi ulaznih protoka goriva, uz aktiviranje izvornih članova u transportnim jednačinama održanja hemijskih komponenti. Svaki od proračunskih koraka obuhvata period simulacije u trajanju od približno 2.5 s, pri čemu drugi proračunski period počinje sa uvođenjem goriva, posle uspostavljanja razvijene turbulencije i završava se nakon 2.5 – 3 s. Posle ovog perioda može se usvojiti da nastupa kvazistacionaran period jer su dalje promene, u osnovi periodične, ali u srednjem obimu sa zanemarljivim promenama.

Slika 1

Simulacija nestacionarnog temperaturskog polja u FS

Proračunati rasporedi temperatura dobijeni numeričkom simulacijom sagorevanja čistog dizel goriva u FS prikazani su na slici 2. Polja temperatura gasova sa slike 2. reprezentuju termičke karakteristike fluidizacionog reaktora za period počev od 600 ms posle početka uvođenja goriva u zagrejan fluidizovan sloj. Temperatursko polje u zoni intenzivnih reakcija u okviru fluidizacione komore sagorevanja, kako se sa slike 2. vidi, harmonijski se menja u vremenu, pa se u ovakvim ložištima mogu razmatrati kvazistacionarni uslovi.

Slika 2 Promena u vremenu temperaturskog polja u fluidizacionoj komori sagorevanja

Rezultati numeričkih eksperimenata

Izračunati profili usrednjenih po vremenu temperatura po visini fluidizacionog reaktora, za četiri režima (bez prisustva vlage u gorivu i sa prisustvom vode u gorivu, čija je vrednost masenih udela 0.05, 0.1, i 0.2) su prikazani na slici 3. Pošto radijalni profili temperatura nisu simetrični, već se stohastički menjaju u vremenu, razmatrane su maseno usrednjene vrednosti radijalnih temperatura. Na ordinati slike 3. je normalizovana temperatura (temperatura podeljena sa maksimalnom temperaturom (T_{max}) za dati režim), a na apscisi je bezdimenziona visina u reaktoru, koja predstavlja visinu podeljenu sa visinom nasutog sloja (H_b) u ložištu.

Na profilima temperatura duž visine fluidizacionog ložišta, sa slike 3, uočavaju se nagli skokovi temperatura već u zonama bliskim dnu fluidizovanog sloja i to kako kod eksperimenata tako i za rezultate nimeričkih simulacija. Ovo je značajno sa tačke gledišta optimizacije radne zapremine ložišta, jer odavde proizilazi da su zone intenzivnog sagorevanja pomerene ka dnu FS, pa je prema tome ukupna radna zapremina kod ove tehnologije znatno manja nego kod ostalih ložišta, čak i za slučajeve kada gorivo sadrži značajan procenat vode. Sa slike 3. se čak može uočiti da su maksimalne temperature na profilima po visini reaktora malo više pomerene ka dnu FS kod slučajeva sagorevanja goriva koje sadrži vodu. Iz ovoga se može zaključiti da prisustvo vode u gorivu dovodi do dodatnog, blagog povlačenja zone intenzivnog sagorevanja ka nižim zonama reaktora, tj. do poboljšanja efikasnosti sagorevanja.

Slika 3. Predviđanje profila srednjih temperatura duž visine fluidizacionog ložišta.

Zapaženi efekat uticaja vode u gorivu na globalnu kinetiku sagorevanja tečnog goriva u FS može biti objašnjen poboljšanjem kontakta između goriva i oksidatora usled ekspanzije vodene pare, u većem broju numeričkih čvorova simulirane zone sagorevanja. Sa druge strane, veći sadržaj vode u gorivu dovodi do sniženja lokalnih temperatura a time i brzina reakcija (u skladu sa Arrhenius-ovim izrazom). Zbog ova dva suprotna efekta, dijagram na slici 4. ima maksimum.

285

Analizirajući rezultate numeričkih eksperimenata, može se zaključiti da postoji optimalan režim fluidizacije sa stanovišta veličine zone sa intenzivnim sagorevanjem. Za razmatrane uslove sagorevanja stepen fluidizacije $N_f = 3.15$ dovodi do nešto većeg stepena uvlačenja zone intenzivnog sagorevanja prema nižim delovima reaktora, odnosu na druga dva režima. U slučaju manjih od optimalnog stepena fluidizacije ($N_f = 3.15$) heterogene reakcije imaju manji intenzitet, tako da se zona intenzivnog sagorevanja kreće ka višim delovima reaktora. S druge strane, veća radna zapremina potpunog sagorevanja, u slučaju većeg od optimalnog stepena fluidizacije je rezultat velikog odnosa vazduh-gorivo i velike vrednosti Peclet broja. Intenzitet brzine reakcije isparavanja goriva raste sa stepenom fluidizacije, ali raste i povećanje zapremine zone intenzivnog sagorevanja. Ova dva efekta su u suprotnosti sa tačke gledišta optimalnih uslova rada komore sagorevanja, pa zavisnost uslova optimalnog sagorevanja u FS od stepena fluidizacije ima maksimum.

5 Zaključak

U radu je predstavljen dvodimenzijski CFD model fluidizovanog sloja, zasnovan na dvofluidnom postupku simulacije FS u skladu sa Euler-Euler granularnim modelom fluidizovanog sloja. Predloženi granularni model podrazumeva da se gas i gusta faza FS (granularni sloj) posmatraju kao dva fluida sa različitim karakteristikama za koje se posebno računaju jednačine kontinuiteta i prenosa količine kretanja, pri čemu se za granularnu fazu računaju granularna temperatura kao i viskoznost usled napona smicanja i zapreminska viskoznost, uz primenu Syamlal-O'Brien modela sila otpora između faza.

Za realnije numeričko praćenje fluido-dinamičkih karakteristika mehurastog fluidizovanog sloja sa hemijskim reakcijama, neophodno je prilagoditi konstante koeficijenta B iz izraza Syamlal-O'Brienovog modela sila otpora između faza.

Numerički eksperimenti, predstavljeni u radu, su u prvom redu primenjeni na analizu uticaja prisustva vode u model gorivu (dizel) na kinetiku reakcija u fluidizacionoj komori sagorevanja tečnog goriva. Pri tome su proračuni obradili slučajeve sagorevanja dizel goriva sa 0, 0.1, 0.2, 0.3 i 0.4 masena udela vode, a od rezultata simulacije prikazani su: vertikalni profili temperatura, osrednjene vrednosti globalnih brzina hemijskih reakcija i vertikalni profili koncentracija CO u komori sagorevanja.

Svi analizirani rezultati numeričkih simulacija ukazuju da prisustvo vode u gorivu može malo da poveća sumarnu brzinu hemijskih reakcija, što se prvenstveno može videti u povlačenju zone sa maksimalnim temperaturama, tj. oblast intenzivnog sagorevanja, ka nižim zonama reaktora i u povećanju sumarnih brzina hemijskih reakcija kod režima gde gorivo sadrži vodu.

Zapaženi efekat uticaja vode u gorivu na globalnu kinetiku sagorevanja tečnog goriva u FS može biti objašnjen intenziviranjem kontakta između goriva i oksidatora usled ekspanzije vodene pare. Međutim, veći sadržaj vode u gorivu dovodi do sniženja lokalnih temperatura a time i brzina reakcija, pa ovi efekti imaju svoj maksimum, tj. najizraženiji su kod režima sa 10 masenih procenata vode u gorivu, za razmatrane slučajeve sagorevanja dizel goriva.

Razvijeni numerički postupak je takođe primenjen na analizu uticaja različitih fluidizacionih režima na efikasnost sagorevanja tečnih goriva u ložištima sa FS. Za razmatrane uslove sagorevanja stepen fluidizacije $N_f = 3.15$ dovodi do nešto većeg stepena uvlačenja zone intenzivnog sagorevanja prema nižim delovima reaktora. Efekat povećanja intenziteta heterogenih reakcija sa povećanjem stepena fluidizacije je u suprotnosti sa efektom povećanja zapremine zone intenzivnog sagorevanja za više vrednosti N_f , sa tačke gledišta optimalnih uslova rada komore sagorevanja, pa zavisnost uslova optimalnog sagorevanja od stepena fluidizacije ima maksimum.

Zahvalnost

Ovaj rad je realizovan u okviru projekta „Unapređenje industrijskog postrojenja sa fluidizovanim slojem u okviru razvoja tehnologije za energetski efikasno i ekološki opravdano sagorevanje različitih otpadnih materija u fluidizovanom ložištu”, TR33042. Ministarstva prosvete i nauke Republike Srbije.

Oznake

C_D	koeficijent otpora	I_{2D}	druga invarijanta devijatora tenzora
$c_{p,g}$	specifične toplote gasa i čestica	K_{gs}	koeficijent otpora između fluida i čvrste (granularne) faze
$c_{p,s}$		k_t	termička provodnost
$D_{i,m}$	difuzioni koeficijent komponente i	k_o	pre-eksponencijalni koeficijent
d_s	srednji prečnik čestice	$k_{\Theta s}$	difuzioni koeficijent granularne energije
E_a	energija aktivacije	p	pritisak
e_s	koeficijent restitucije čestica između sudara	R	univerzalna gasna konstanta
$\vec{g}$	gravitaciono ubrzanje	$\bar{S}_k$	tenzor brzine deformacije
g_{0s}	funkcija radijalne distribucije	T	apsolutna temperatura
h	koeficijent prelaza toplote	T_{max}	maksimalna temperatura za dati režim
H	visina	$\vec{u}$	vektor brzine
H_{fb}	visina nasutog sloja	Y_i	maseni udeo komponente i
$\bar{\bar{I}}$	jedinični tenzor		

Greek symbols

α	zapreminski udeo faze
ρ	gustina
λ	zapreminska viskoznost
λ_v	koeficijent viška vazduha
$\bar{\bar{\tau}}$	tenzor napona faze
Θ_s	granularna temperatura
$\mu_{s,kin}$	kinetička komponenta smicajne viskoznosti granularne faze
$\mu_{s,coll}$	komponenta smicajne viskoznosti usled sudara
$\mu_{s,fr}$	frikciona viskoznost
ϕ	ugao međučestični kolizije
ϕ_{gs}	intenzitet prenosa kinetičke energije
$\gamma_{\Theta s}$	disipacija granularne energije usled neelastičnih sudara čestica

Indexes

b	fluidizovan sloj
g	gasna faza
s	čestice, čvrsta faza

Literatura

- [1] S.C. Saxena & C.K. Jotshi, Fluidized Bed Incineration of Waste Materials, Prog. Energy Combust. Sci. Vol. 20 pp. 281-324, 1994.
- [2] Gera. D., Gautam.M., Tsuji. Y., Kawaguchi, T., Tanaka, T., 1998, Computer simulation of bubbles in large-particle fluidized beds, Powder Technol, 98, 3847.
- [3] Ibsen, C., Helland. E., Hjertager, B., Solberg, T., Tadrist, L., Occelli, R., 2004, Comparison of multifluid and discrete particle modelling in numerical predictions of gas particle flow in circulating fluidised beds, Powder Technol, 149, 29–41.
- [4] Bokkers GA, van Sint Annaland M, Kuipers JAM, Mixing and segregation in a disperse gas–solid fluidised bed: a numerical and experimental study, Powder Technol 2004;140:176–86.

- [5] Alberto Di Renzo, Francesco Paolo Di Maio, Homogeneous and bubbling fluidization regimes in DEM–CFD simulations: hydrodynamic stability of gas and liquid fluidized beds, *Chem. Eng. Sci.* 62 (2007) 116–130.
- [6] H. Enwald, E. Peiran, A.E. Almstedt, B. Leckner, Simulation of the fluid dynamics of a bubbling fluidized bed, Experimental validation of the two-fluid model and evaluation of a parallel multi-block solver, *Chem. Eng. Sci.* 54 (1999) 311–328.
- [7] Cammarata L. Lettieri P. Micale GDM. Colman D. 2d and 3d CFD simulations of bubbling fluidized beds using Eulerian–Eulerian models, *Int J Chem Reactor Eng* 2003;1, article 48.
- [8] Behjat Y, Shahhosseini S, Hashemabadi SH, CFD modeling of hydrodynamic and heat transfer in fluidized bed reactors, *Int Commun Heat Mass Transfer* 2008;35:357–68.
- [9] Gidaspow, D., “Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions,” San Diego. Academic Press (1994).
- [10] Syamlal, M. and T. J. O’Brien, “Simulation of Granular Layer Inversion in Liquid Fluidized Beds,” *Int. J. Multiphase Flow.* 14(4), 473–481 (1988).
- [11] Farshid Vejahati, Nader Mahinpey, Naoko Ellis and Mehrdokht B. Nikoo, CFD Simulation of Gas–Solid Bubbling Fluidized Bed: A New Method for Adjusting Drag Law, *Can. J. Chem. Eng.* 87:19–30, 2009.
- [12] Syamlal, M., W. Rogers and T. J. O’Brien, “MFIx Documentation Theory Guide,” U.S. Department of Energy Office of Fossil Energy Morgantown Energy Technology Center, Morgantown, WV (1993).
- [13] Lun, C. K. K., S. B. Savage, D. J. Jeffrey and N. Chepurniy, “Kinetic Theories for Granular Flow: Inelastic Particles in Couette Flow and Slightly Inelastic Particles in a General Flow Field,” *J. Fluid Mech.* 140, 223–256 (1984).
- [14] D. G. Schaeffer, Instability in the Evolution Equations Describing Incompressible Granular Flow, *J. Diff. Eq.*, 66:19–50, 1987.
- [15] Gunn, D.J., (1978), “Transfer of heat or mass to particles in fixed and fluidized beds”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 21, 467–476.
- [16] Syamlal, M., and Gidaspow, D., 1985, "Hydrodynamics of Fluidization: Prediction of Wall to Bed Heat Transfer Coefficients," *AIChE J.*, 31, 127–135.
- [17] O.G. Penyazkov, K.L. Sevrout, V. Tangirala, N. Joshi, Autoignitions of Diesel Fuel/Air Mixtures Behind Reflected Shock Waves, *Proceedings of the European Combustion Meeting* 2009.
- [18] Brennan, J. F., Shapiro, J. S., Watton, E. C., Evaporation of liquids: A kinetic approach, *J. Chem. Educ.*, 51 (1974), 4, p. 276.
- [19] Milica R. Mladenović, Dragoljub V. Dakić, Stevan Đ. Nemoda, Rastko V. Mladenović, Aleksandar M. Erić, Milijana Paprika, Mirko S. Komatina, Vertical temperature profile in the installation for the combustion of waste fuels in the fluidized bed furnace, 15th Symposium on Thermal Science and Engineering of Serbia, Conference proceedings on CD-ROM, *Proceedings ISBN 978-86-6055-018-9*, pp 490–499, Sokobanja, Serbia, October 18–21, 2011.
- [20] Milica R. Mladenović, Milijana J. Paprika, Dragoqub V. Dakić, Stevan Đ. Nemoda, Aleksandar M. Erić, Mirko S. Komatina: Vertikalni profil temperature u instalaciji za sagorevanje otpadnih goriva sa fluidizovanim slojem, *TERMOTEHNIKA*, 2012, XXXVIII, 1, 11–24.
- [21] Nemoda, S., Mladenović, M., Dakić, D., Komatina, M., Erić, A., Đurović, D. Numerical simulation of gas and liquid fuel feeding in a fluidized bed using fluid-porous medium model and two-fluid Euler–Euler granular flow model, *International Conference Power Plants* 2012, October 30–November 2nd 2012, Zlatibor, Serbia, *Proceedings on CD ROM*, pp. 1150–1169, ISBN 978-86-7877-021-0.