太阳能 CO₂ 煤气化反应器玻璃窗清洁度的数值模拟

代少猛^{1,2}, 常哲韶^{1*}, 常春¹, 李鑫^{1,2*}

1. 中国科学院电工研究所, 北京 100190;

2. 中国科学院大学, 北京 100049

* 联系人, E-mail: changzheshao@mail.iee.ac.cn; drlixin@mail.iee.ac.cn

2018-11-06 收稿, 2018-11-16 修回, 2018-11-20 接受, 2019-01-25 网络版发表

国家自然科学基金(51476163)资助

摘要 太阳能二氧化碳煤气化拥有减少CO₂排放, 清洁、节能地制取高品质高纯度气体燃料的优点. 作为太阳能热化学制备清洁燃料的核心部件, 旋风流反应器便于输运、液态排渣、效率高、易实现, 然而直接式反应器的一个主要问题是煤颗粒会沾染反应器玻璃窗口, 影响反应器效率和安全性. 针对三维直接辐照旋流太阳热化学反应器, 并考虑能流椭球型分布及聚光边界条件, 本文采用欧拉-拉格朗日方法建立了气固两相流数学模型并耦合煤颗粒、气体的参与性介质辐射和化学反应动力学模型. 与苏黎世联邦理工学院的实验结果对比验证之后, 研究了CO₂进气质量流量配比和煤颗粒质量流量对石英玻璃窗表面沉积煤颗粒的影响规律. 计算结果表明, 保持玻璃窗口清洁主要取决于进气质量流量配比, 当CO₂与煤颗粒的摩尔比在1.3~1.8的范围内, 腔体、清扫玻璃和输送煤颗粒气体质量流量分别占总CO₂进气质量流量的范围为71.9%~78.2%, 15.7%~20.7%和5%~10%, 玻璃窗口清洁度最优. 煤颗粒质量流量对石英玻璃窗表面沉积煤颗粒的影响不大, 但会显著影响煤颗粒运动轨迹.

关键词 太阳能反应器, CO₂, 煤气化, 玻璃窗口, 煤颗粒沉积

太阳能CO₂煤气化技术利用高倍聚光的太阳能产生1000℃以上的高温^[1], 使煤粉颗粒与CO₂在太阳能反应器中反应产生CO, 如式(1). 与普通工业煤气化技术相比, 太阳能CO₂煤气化技术具有减少CO₂排放、产气纯度高等优点, 同时能把不稳定的、间歇性的太阳能存储在清洁燃料中, 因此具有广阔的应用前景.

太阳能反应器作为太阳能煤气化的核心部件, 主要分为直接式和间接式. 直接式太阳能反应器一般可分为堆积床^[2]、气流床^[3-6]、流化床^[1,7,8]等类型. 间接式太阳能反应器有双区域反应器^[9]、旋风流反应器^[10]等. 相对于间接式反应器而言, 直接式太阳能反应器反应腔和吸热腔一体化, 碳质原料直接暴露于聚集的太阳辐射下, 能达到更高的反应温度、碳颗

粒化学反应更充分、热效率更高, 因此, 直接式反应器成为研究的热点.

Steinfeld团队^[3-6]设计了一个5 kW的旋风流反应器. 高倍聚光的辐射通过玻璃窗进入反应器以加热反应物. 在腔体内部, 反应物以旋流的方式从反应器的前部流到反应器的后部. 辅助气体沿切线方向进入, 在玻璃窗处形成保护温度并冷却玻璃窗, 同时防止颗粒沉积在玻璃窗上. 以色列魏兹曼科学研究所(WIS)的Abraham等人^[11]设计了一种新型的旋风流反应器热解甲烷, 采用少于5%主气流量的飓风流能够有效清扫玻璃并减少热损失.

Nesrin团队^[12-18]采用CFD(computational fluid dynamics)方法对太阳能反应器内天然气裂解进行了深入的研究. Nesrin和Jayakrishna^[12]观察到反应器壁

引用格式: 代少猛, 常哲韶, 常春, 等. 太阳能 CO₂ 煤气化反应器玻璃窗清洁度的数值模拟. 科学通报, 2019, 64: 621-631

Dai S M, Chang Z S, Chang C, et al. Numerical simulation of cleanliness of glass window in solar CO₂ coal gasification reactor (in Chinese). Chin Sci Bull, 2019, 64: 621-631, doi: 10.1360/N972018-01090

上的层流罩和反应器内部的涡流增加了碳颗粒的停留时间,显著减少了壁面碳沉积和出口堵塞. Nesrin和Anoop^[14]研究了进气角度和流速等多个参数来预测反应器窗口在各种流动条件下的颗粒沉积情况,但并没有考虑太阳辐射造成的温度场对气固两相流的影响. 随后, Nesrin等人^[16]设计了一种可屏蔽太阳能的旋风反应器,增加停留时间并克服反应器壁面碳沉积的问题.

总之,以上直接式反应器的实验和模拟研究结果都表明,石英玻璃窗的清洁是保证反应器安全及提高效率的一个技术难题. 通常石英窗口用氩气吹扫以避免被煤灰和焦油污染,但是,这也导致热效率降低以及与产气分离的困难. 本文以直接式旋风流反应器为研究对象,采用CO₂气体作为反应物的同时也用于吹扫石英玻璃窗口. 采用UDF(user defined functions)编程实现能流椭球型分布及聚光,采用欧拉-拉格朗日方法,建立气固两相流动模型,并耦合煤颗粒及气体的参与性介质辐射和化学反应动力学模型,研究CO₂进气质量流量配比和煤颗粒质量流量对玻璃窗口表面沉积煤颗粒的影响规律.

1 太阳能反应器结构

设计出10 kW直接式太阳能旋流反应器,如图1(a)所示. 为了阻止煤颗粒沉积到玻璃窗口,设计4个吹扫窗口玻璃进气口,沿着靠近反应器窗口的圆周切向流入标记为 u_{sf} . 输送煤颗粒的CO₂气流进口标记为 u_{cf0} . 为了保持反应器壁面清洁并在反应器中产生旋流,增加煤颗粒滞留时间与CO₂在反应腔充分反应,在反应腔体设计两处共8个旋流进气口,分别被标记为 u_{cf1} 和 u_{cf2} . 图1(b)所示为反应器几何尺寸.

图1 (网络版彩色)10 kW反应器结构. (a) 带入口点的反应器几何形状; (b) 反应器几何尺寸. 1, 玻璃窗口; 2, 清扫玻璃进气口 u_{sf} ; 3, 复合抛物面集热器(CPC); 4, 第一处腔体旋风进气口 u_{cf1} ; 5, 第二处腔体旋风进气口 u_{cf2} ; 6, 出口; 7, 采光口; 8, 输送煤颗粒进口 u_{cf0} ; 9, 反应器腔体

Figure 1 (Color online) 10 kW reactor structure. (a) Geometry with inlet points; (b) dimensions of the solar reactor. 1, Window; 2, window screening flow inlets (u_{sf}); 3, CPC, compound parabolic collector; 4, the first cyclone inlets (u_{cf1}); 5, the second cyclone inlets (u_{cf2}); 6, outlet; 7, the opening aperture; 8, particle seeding inlet (u_{cf0}); 9, cavity

2 数学模型

假设煤颗粒为球形颗粒,灰体-吸收-发射-各向同性散射介质,作为离散相,二氧化碳和一氧化碳气体假设为吸收-发射-非散射气体,作为连续相. 控制方程使用有限体积法求解,化学反应采用有限速率模型/涡流耗散模型,煤颗粒先挥发发热解后气化,分别采用两步竞争模型和多表面反应模型. 用Discrete Random Walk跟踪煤颗粒轨迹. 本文在稳态下对带有保温层的反应器模型进行数值计算.

2.1 控制方程

质量守恒方程:

固相:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (z_p \rho_p u_p^i) = R_p. \quad (2)$$

气相:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (z_g \rho_g u_g^i) = R_g, \quad (3)$$

式中 z_p 为固相微粒体积分数, z_g 为气相体积分数, $z_p+z_g=1$, u_g , u_p 分别为气体和颗粒的速度, ρ_g , ρ_p 分别为气体和颗粒的密度, R_p , R_g 为颗粒在单位时间、单位混合物体积内发生化学反应而增加的质量 $R_g=-R_p$,由式(11)和式(12)计算.

动量守恒方程:

固相:

$$\frac{\partial (z_p \rho_p u_p^i u_p^j)}{\partial x_j} = z_p \rho_p g_i + F_D + R_p u_p^i, \quad (4)$$

气相:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(z_g \rho_g u_g^i u_g^j)}{\partial x_j} = & -z_g \frac{\partial P}{\partial x_i} + z_g \rho_g g_i \\ & + \mu_g \left[\left(\frac{\partial^2 u_g^i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 u_g^j}{\partial x_i \partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial^2 u_g^k}{\partial x_j \partial x_k} \delta^{ij} \right] - F_D \\ & + R_g u_g^i, \end{aligned} \quad (5)$$

摩擦阻力:

$$F_D = \frac{C_D}{2} \rho_g A_p |u_g^i - u_p^i| (u_g^i - u_p^i), \quad (6)$$

阻力系数:

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}} (1 + 0.15 \text{Re}^{0.687}), \quad (7)$$

颗粒雷诺数:

$$\text{Re} = \frac{\rho_g d_p |u_g^i - u_p^i|}{\mu_g}, \quad (8)$$

式中 μ_g 为气体项的黏性系数, 颗粒群总面积 $A_p = N_p \pi r_p^2$. 在固相方程中, 煤颗粒浓度较稀, 忽略颗粒自身间的相互碰撞, 不考虑颗粒自身的分压 p_p , 黏性应力 τ_p 和热致迁移力等. 气相方程右边分别为压力梯度项、重力项、黏性力项、气体和固体颗粒间的曳力项、固相和气相由于化学反应引起的质量变化而产生的动量变化.

能量守恒方程:

固相:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(z_p \rho_p u_p^i h_p)}{\partial x_i} = & \varepsilon_p A_p \sigma (T_R^4 - T_p^4) - \frac{6 \cdot \text{Nu} \cdot f_v \cdot k_g}{D^2} (T_p - T_g) \\ & - \sum_{k=1}^3 h_k(T) \cdot R_k, \end{aligned} \quad (9)$$

气相:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(z_g \rho_g u_g^i h_g)}{\partial x_i} = & \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_j h_j J_j + u_g^j (\tau_{ij})_{\text{eff}} \right) \\ & + \frac{6 \cdot \text{Nu} \cdot f_v \cdot k_g}{D^2} (T_p - T_g) + \sum_{k=1}^3 h_k(T) \cdot R_k, \end{aligned} \quad (10)$$

式中 $T_R = \left(\frac{\int_{\Omega=4\pi} I d\Omega}{4\sigma} \right)^{1/4}$ 为辐射温度, k_{eff} 为有效热传导

系数, 反应速率 R_k 由式(11)和(12)计算, 取决于固相温度, 气体组分和颗粒尺寸分布. 煤颗粒稀疏且粒径小, 因此固相方程忽略热传导、扩散项和黏性耗散项, 右边分别为辐射换热项、对流换热项和化学反应动力学项, 气相方程右边分别为热传导、组分扩散项、黏

性耗散项、气固对流换热项和化学反应动力学项.

在微粒表面化学反应模型中, 使用式(11)和(12)表示煤颗粒与 CO_2 之间化学反应的速率.

$$\bar{\mathfrak{R}}_{c,r} = A_p \eta_r Y_c \mathfrak{R}_{c,r}, \quad (11)$$

$$\mathfrak{R}_{c,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-(E_r/RT)} \left(p_{\text{CO}_2} - \frac{\mathfrak{R}_{c,r}}{D_{0,r}} \right)^{N_r}, \quad (12)$$

$$D_{0,r} = C_{1,r} \frac{[(T_p + T_\infty)/2]^{0.75}}{d_p}, \quad (13)$$

式中 $\bar{\mathfrak{R}}_{c,r}$, Y_c , η_r , $\mathfrak{R}_{c,r}$, $D_{0,r}$ 和 N_r 分别为微粒表面组分侵蚀速率(kg/s)、碳微粒的质量分数、效率因子、单位面积上碳微粒表面组分化学反应速率(kg/(m² s))、扩散系数和名义阶数. 活化能和频率因子分别为 $E_r = 245 \text{ kJ/mol}$ 和 $A_r = 1.12 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ [19].

采用离散坐标(DO)辐射模型求解有限数量的离散立体角的辐射传递方程, 与其他辐射模型相比, DO模型可适用于整个光学厚度的范围, 包括半透明壁上的辐射传输. DO模型把沿 $\vec{s}$ 方向传播的辐射方程视为场方程:

$$\begin{aligned} \nabla(I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s}) + (a + \sigma_s) I(\vec{r}, \vec{s}) \\ = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}) \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega', \end{aligned} \quad (14)$$

式中 a , n , σ_s , σ , I , Φ , Ω' 和 $(a + \sigma_s)$ 分别为吸收系数、折射系数、散射系数、斯蒂芬-玻尔兹曼常数($5.67 \times 10^{-8} \text{ W/(m}^2 \text{ K}^4)$)、辐射强度、凝聚相的散射相函数、立体角和介质的消光系数.

DO模型在辐射过程中忽略所有的气相散射. 在辐射传递方程中, 颗粒相的影响表示为

$$\begin{aligned} \nabla(I\vec{s}) + (a + a_p + \sigma_s) I(\vec{r}, \vec{s}) \\ = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + E_p + \frac{\sigma_p}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}) \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega', \end{aligned} \quad (15)$$

式中 a_p 为包括颗粒影响的等效吸收系数, E_p 为等效发射率, σ_p 为等效颗粒散射系数.

根据米氏散射理论计算的颗粒吸收因子和散射因子取决于太阳光谱的波长和平均颗粒半径. 在本研究中, 假定煤颗粒直径平均分布, 煤颗粒体积分数 f_v 为 1×10^{-5} , 计算出 $10 \text{ } \mu\text{m}$ 直径颗粒的吸收和散射系数分别为 0.9 和 1.1 m^{-1} .

粒子群的吸收和散射系数为

$$k = \frac{3f_v}{2d} Q_{a\lambda}, \quad (16)$$

$$\sigma_s = \frac{3f_v}{2d} Q_{s\lambda}. \quad (17)$$

反应器内层为氧化铝陶瓷($k_1=25$ W/mK), 中间层为 Inconel 601($k_2=11.2$ W/mK), 外层为保温层($k_3=0.1$ W/mK)^[20], 最外层为不锈钢壳体($k_4=202.4$ W/mK), 本文把反应器等效为四层圆筒壁, 导热热流量为

$\phi =$

$$\frac{2\pi l(T_{\text{cavity}} - T_{\infty})}{\ln(d_2/d_1)/k_1 + \ln(d_3/d_2)/k_2 + \ln(d_4/d_3)/k_3 + \ln(d_5/d_4)/k_4}, \quad (18)$$

式中 T_{cavity} 为反应器腔体平均温度, T_{∞} 为环境温度, l 为等效反应器长度, d_1 为反应器内层氧化铝陶瓷内径, d_2 为反应器内层氧化铝陶瓷外径, d_3 为保温层内径, d_4 为保温层外径, d_5 为外层壳体外径.

2.2 边界和操作条件

根据文献[20]中的数据, 使用煤炭计算器来设定煤粉的元素组成和比例. 煤颗粒从其入口位置垂直注入, 离散的煤颗粒在壁面上反射并从自由出口逸出. CO_2 进气垂直于进气面, 采用质量流量进气的边界条件. 在所有的数值计算中, 使用UDF实现能流椭球型分布, 根据焦点及玻璃微元面点的坐标, 在UDF中求出射线向量作为聚光的方向, 以实现聚光的效果.

$$f(x, y) = A_0 \exp \left\{ - \left[\frac{((x-x_c)\cos\theta_0 + (y-y_c)\sin\theta_0)^2}{2\sigma_a^2} + \frac{(-(x-x_c)\sin\theta_0 + (y-y_c)\cos\theta_0)^2}{2\sigma_b^2} \right] \right\}, \quad (19)$$

式中 $A_0 > 0$, $\theta_0 \in (-90^\circ, 90^\circ]$ 是椭圆长轴按逆时针方向偏离 x 轴正向的角度, σ_a 和 σ_b 分别是沿着椭圆长轴方向和椭圆短轴方向的高斯剖线的标准偏差, (x_c, y_c) 是峰值点位置的坐标.

$$T_{\text{Cin}} = T_{\text{CO}_2\text{-in}} = T_{\text{wall}} = T_{\infty} = 300 \text{ K}. \quad (20)$$

$$D_{\text{coal}} = 10 \text{ }\mu\text{m}. \quad (21)$$

2.3 模型验证

为保证计算结果的可靠性, 本文对模型的网格独立性进行了验证. 在相同的边界条件, 不同网格数量下, 将反应器出口处的面积加权平均温度进行比

较. 表1所示为网格独立性测试的结果. 从表1可以看出, 将网格数量从28260增加到410738反应器内质量加权平均温度变化不大. 考虑到计算的准确性和经济性, 采用2# 网格尺寸.

如表2所示, 本文的数值计算结果与文献[20]进行对比. 本文数值模拟的腔体平均温度 T_{cavity}^* 低于文献[20]中实验测得的腔体温度 T_{cavity} , 温度误差在10%左右. 误差一方面在于实验中能流具有高斯分布和方向, 但文献中并没有具体描述, 数值计算中保持输入功率相同, 采用UDF实现能流高斯分布和聚光, 但难以做到完全一致; 另一方面文献中只描述了测量温度的固定点沿轴向分布, 没有告诉具体尺寸和径向分布参数, 数值计算中 T_{cavity}^* 为对应位置局部区域的加权平均温度.

3 结果分析

根据煤颗粒沉积玻璃窗口的平均密度数量级大于 10^{-6} 和煤颗粒运动轨迹穿过采光口并贴近玻璃表面的相互验证, 可以判定玻璃窗口上沉积了煤颗粒. 要确保玻璃窗口清洁, 并使煤颗粒与 CO_2 具有较高的转化率, CO_2 进气质量流量配比及 $n_{\text{CO}_2} : n_{\text{coal}}$ 摩尔比是主要影响因素.

3.1 进气质量流量的影响

保持 $m_{\text{coal}}=2.5 \times 10^{-4}$ kg/s 不变. 改变进气 CO_2 质量流量. 为保证煤颗粒充分反应, CO_2 质量流量应过量, 但同时过多的 CO_2 质量流量导致 CO_2 转化率降低. 因此, CO_2 进气质量流量配比及 $n_{\text{CO}_2} : n_{\text{coal}}$ 摩尔比存在最优比例范围.

(i) 腔体进气质量流量的影响. 从图2和表3可知, (a)~(d)煤颗粒轨迹被限制在采光口区域, 煤颗粒轨迹都在腔体内部, 且玻璃窗口煤颗粒的平均密度数量级都小于 10^{-6} , 可以判定玻璃窗口保持清洁, 而

表1 网格无关性测试结果

Table 1 Grid independent test results

编号	网格	腔体质量加权平均温度(K)	误差(%)
0#	28260	921	7.0
1#	161420	1003	1.3
2#	263146	991	0.1
3#	410738	990	-

表 2 比较ETH旋风流反应器^[20]和本文数值计算的操作条件和结果

Table 2 Compare the experimental conditions and results with ETH cyclone reactor^[20] and numerical calculations

#	$m_{\text{coal}}(\text{g/min})$	$m_{\text{H}_2\text{O}}(\text{g/min})$	$n_{\text{Ar}}(\text{mol/min})$	$Q_{\text{solar}}(\text{kW})$	$T_{\text{cavity}}(\text{K})$	$T_{\text{cavity}}^{\circ}(\text{K})$	误差(%)
16	3.5	9.0	0.27	6.6	1671	1526	8.7
21	3.5	9.0	0.27	5.0	1439	1284	10.8
22	3.5	9.0	0.27	4.3	1355	1212	10.6

图 2 (网络版彩色)改变腔体(u_{cf1} , u_{cf2})进气质量流量时,煤颗粒滞留时间迹线图

Figure 2 (Color online) Changing the cavity (u_{cf1} , u_{cf2}) intake gas mass flow, coal particle residence time trace

且(d)中 CO_2 与煤颗粒的摩尔比较小($n_{\text{CO}_2} : n_{\text{coal}} = 1.298$),有利于提高 CO_2 转化率.从(d)~(f)可知, CO_2 与煤颗粒的进气质量流量和摩尔比相同,但是(d)中玻璃窗口保持清洁,(e),(f)中有煤颗粒沉积到玻璃窗口,三者仅有进气质量流量配比不同,保持玻璃窗口清洁取决于进气质量流量配比.从表3可知,保持玻

璃窗口清洁,可取腔体进气质量流量占总 CO_2 进气质量流量的范围为71.9%~78.2%.

(ii) 清扫玻璃进气质量流量的影响.从图3和表4可知,(a)有大量煤颗粒通过采光口向玻璃运动,玻璃窗口煤颗粒密度达到 $4.76 \times 10^{-5} \text{ kg/m}^3$,可以判定煤颗粒沉积到玻璃窗口,清扫玻璃进气质量流量仅

表3 CO₂和煤颗粒质量流量及摩尔比

Table 3 The mass flow rate and molar ratio of CO₂ and coal particle

#	u_{cf0}	u_{sf}	u_{cf1}	u_{cf2}	m_{CO_2}	m_{coal}	$(u_{cf1} + u_{cf2}) / m_{CO_2}$	$n_{CO_2} : n_{coal}$	玻璃窗口沉积煤 颗粒密度(kg/m ³)	玻璃窗 口清洁 ^{a)}
							(%)			
			(×10 ⁻⁴ kg/s)							
(a)	1.4	2.5	7	7	17.9	2.5	78.2	1.953	1.02×10 ⁻⁹	Y
(b)	1.4	2.5	6	6	15.9	2.5	75.5	1.735	1.73×10 ⁻¹²	Y
(c)	1.4	2.5	5	5	13.9	2.5	71.9	1.516	2.15×10 ⁻⁸	Y
(d)	1.4	2.5	4	4	11.9	2.5	67.2	1.298	2.31×10 ⁻¹¹	Y
(e)	1.4	2.5	5	3	11.9	2.5	67.2	1.298	6.22×10 ⁻⁶	N
(f)	1.4	2.5	6	2	11.9	2.5	67.2	1.298	1.91×10 ⁻⁶	N

a) Y为是, N为否

图3 (网络版彩色)改变清扫玻璃(u_{sf})进气质量流量时,煤颗粒滞留时间迹线图

Figure 3 (Color online) Changing the sweeping glass (u_{sf}) intake gas mass flow, coal particle residence time trace

占总CO₂进气质量流量的3.6%,不能阻止煤颗粒沉积玻璃窗口. (b)中玻璃窗口虽保持清洁,但有少量煤颗粒通过采光口向玻璃运动,有沉积到玻璃窗口的趋势,清扫玻璃进气质量流量占总CO₂进气质量流量的

表 4 CO₂ 和煤颗粒质量流量及摩尔比

Table 4 The mass flow rate and molar ratio of CO₂ and coal particle

#	u_{cf0}	u_{sf}	u_{cf1}	u_{cf2}	m_{CO_2}	m_{coal}	u_{sf}/m_{CO_2}	$n_{CO_2}:n_{coal}$	玻璃窗口沉积煤颗粒密度(kg/m ³)	玻璃窗口清洁
	(×10 ⁻⁴ kg/s)						(%)			
(a)	1.4	0.5	6	6	13.9	2.5	3.6	1.516	4.76×10 ⁻⁵	N
(b)	1.4	1.5	6	6	14.9	2.5	10.1	1.625	2.13×10 ⁻⁷	Y
(c)	1.4	2.5	6	6	15.9	2.5	15.7	1.735	1.73×10 ⁻¹²	Y
(d)	1.4	3.5	6	6	16.9	2.5	20.7	1.844	0	Y
(e)	1.4	4.5	6	6	17.9	2.5	25.1	1.953	0	Y
(f)	1.4	5.5	6	6	18.9	2.5	29.1	2.062	6.49×10 ⁻⁷	Y

图 4 (网络版彩色)改变输送煤颗粒进气质量流量, 煤颗粒滞留时间迹线图

Figure 4 (Color online) Changing the conveying coal particle intake gas mass flow, coal particle residence time trace

10.1%. (c)~(f)煤颗粒轨迹被限制在采光口区域, 在腔体内部运动, 玻璃窗口保持清洁, 其中(c)清扫玻璃进

气质量流量占总CO₂进气质量流量的15.7%. (d)~(f)清扫玻璃进气质量流量占总CO₂进气质量流量超过20%,

导致 CO_2 与煤颗粒摩尔比较大, CO_2 转化率会降低. 因此保持玻璃窗口清洁, 可采用清扫玻璃进气质量流量占总 CO_2 进气质量流量的范围为15.7%~20.7%.

(iii) 煤颗粒入口进气质量流量的影响. 图4中保持进气质量流量 $u_{\text{sf}}=2.5\times 10^{-4}$ kg/s, $u_{\text{cf1}}=u_{\text{cf2}}=6\times 10^{-4}$ kg/s不变, u_{cf0} 分别取(a) 0.2×10^{-4} kg/s, (b) 0.6×10^{-4} kg/s, (c) 1×10^{-4} kg/s, (d) 1.4×10^{-4} kg/s, (e) 1.8×10^{-4} kg/s, (f) 2.2×10^{-4} kg/s, 可知, 煤颗粒轨迹都被限制在采光口区域, 处于腔体内部, 玻璃窗口保持清洁. 煤颗粒入口进气质量流量占总 CO_2 进气质量流量较小(1.36%~13.2%), 对煤颗粒沾染玻璃窗口影响很小, 主要作为输送煤颗粒的气体. 可取输送

煤颗粒气体质量流量占总 CO_2 进气质量流量的范围为5%~10%.

3.2 煤颗粒的影响

在数值计算中, 图5采用进气质量流量 $u_{\text{cf0}}=1.4\times 10^{-4}$ kg/s, $u_{\text{sf}}=2.5\times 10^{-4}$ kg/s, $u_{\text{cf1}}=u_{\text{cf2}}=6\times 10^{-4}$ kg/s, $m_{\text{CO}_2}=1.59\times 10^{-3}$ kg/s, m_{coal} 分别取(a) 1.5×10^{-4} kg/s, (b) 2×10^{-4} kg/s, (c) 2.5×10^{-4} kg/s, (d) 3×10^{-4} kg/s, (e) 3.5×10^{-4} kg/s, (f) 4×10^{-4} kg/s的边界条件. 从图5可以看出, 煤颗粒轨迹都被限制在采光口区域, 无煤颗粒沉积到玻璃上, 表明 CO_2 清扫玻璃效果很好, 煤颗粒对玻璃窗口的影响较小. (a)~(c)中煤颗粒轨迹较好,

图5 (网络版彩色)改变煤颗粒质量流量时, 煤颗粒滞留时间迹线图

Figure 5 (Color online) Changing the coal particles mass flow, coal particle residence time trace

这是因为CO₂过量,煤颗粒较少,煤颗粒运动轨迹受影响小。(d)~(f)中煤颗粒较多,煤颗粒运动轨迹紊乱,以至于在 $m_{\text{coal}}=4\times 10^{-4}$ kg/s时,有少量煤颗粒通过采光口向玻璃运动。

4 结论

本文建立了三维直接辐照旋流太阳热化学反应器数学模型,并采用UDF编程实现能流椭球型分布及聚光,采用欧拉-拉格朗日方法,建立气固两相流动模型,并耦合煤颗粒及气体的参与性介质辐射和化学反应动力学模型,研究CO₂进气质量流量配比和煤颗粒质量流量对石英玻璃窗表面沉积煤颗粒的影响规律。结果表明:

(1) 清扫玻璃窗口进气CO₂质量流量过小,煤颗粒易沾染玻璃;清扫玻璃窗口进气CO₂质量流量过大,会导致CO₂与煤颗粒的摩尔比增大,降低CO₂转化率。煤颗粒入口进气CO₂质量流量占总进气质量流量较小,主要作为输送煤颗粒的气体。保持玻璃窗口清洁可控制CO₂与煤颗粒的摩尔比在1.3~1.8的范围内,取腔体、清扫玻璃和输送煤颗粒气体质量流量分别占总CO₂进气质量流量的范围为71.9%~78.2%,15.7%~20.7%和5%~10%。

(2) 煤颗粒质量流量增加($1.5\times 10^{-4}\sim 4\times 10^{-4}$ kg/s),可以显著降低CO₂与煤颗粒的摩尔比,但煤颗粒运动轨迹紊乱度会增加,导致少量煤颗粒通过采光口向玻璃运动。

参考文献

- Kodama T, Gokon N, Enomoto S-I, et al. Coal coke gasification in a windowed solar chemical reactor for beam-down optics. *J Sol Energy Eng*, 2010, 132: 041004
- Alonso E, Romero M. Review of experimental investigation on directly irradiated particles solar reactors. *Renew Sust Energy Rev*, 2015, 41: 53-67
- Zraggen A, Steinfeld A. Hydrogen production by steam-gasification of carbonaceous materials using concentrated solar energy-v. Reactor modeling, optimization, and scale-up. *Int J Hydrogen Energy*, 2008, 33: 5484-5492
- Zraggen A. Hydrogen production by steam-gasification of carbonaceous materials using concentrated solar energy-iv. Reactor experimentation with vacuum residue. *Int J Hydrogen Energy*, 2008, 33: 679-684
- Zraggen A, Haueter P, Maag G, et al. Hydrogen production by steam-gasification of petroleum coke using concentrated solar power-iii. Reactor experimentation with slurry feeding. *Int J Hydrogen Energy*, 2007, 32: 992-996
- Zraggen A, Haueter P, Trommer D, et al. Hydrogen production by steam-gasification of petroleum coke using concentrated solar power-ii. reactor design, testing, and modeling. *Int J Hydrogen Energy*, 2006, 31: 797-811
- Kodama T, Enomoto S-I, Hatamachi T, et al. Application of an internally circulating fluidized bed for windowed solar chemical reactor with direct irradiation of reacting particles. *J Sol Energy Eng*, 2008, 130: 014504
- Gokon N, Ono R, Hatamachi T, et al. CO₂ gasification of coal cokes using internally circulating fluidized bed reactor by concentrated Xe-light irradiation for solar gasification. *Int J Hydrogen Energy*, 2012, 37: 12128-12137
- Kruesi M, Steinfeld A. A two-zone solar-driven gasifier concept: Reactor design and experimental evaluation with bagasse particles. *Fuel*, 2014, 117: 680-687
- Müller F, Steinfeld A. A pressurized high-flux solar reactor for the efficient thermochemical gasification of carbonaceous feedstock. *Fuel*, 2017, 193: 432-443
- Abraham K, Meir K. The tornado flow configuration—An effective method for screening of a solar reactor. *Sol Energy Eng*, 2002, 124: 206-214
- Nesrin O, Jayakrishna D. CFD analysis of multi-phase turbulent flow in a solar reactor for emission-free generation of hydrogen. *Chem Eng Trans*, 2010, 21: 1081-1086
- Nesrin O, JayaKrishna D. CFD analysis on the influence of helical carving in a vortex flow solar reactor. *Int J Hydrogen Energy*, 2010, 35: 6248-6260
- Nesrin O, Anoop K. Lagrangian characterization of multi-phase turbulent flow in a solar reactor for particle deposition prediction. *Int J Hydrogen Energy*, 2010, 35: 4496-4507
- Nesrin O, Anoop K. A CFD study on the effect of carbon particle seeding for the improvement of solar reactor performance. *Heat Transfer*, 2010, 132: 143-152
- Nesrin O, Min-Hsiu C, Gerald M. Computational fluid dynamics and particle image velocimetry characterization of a solar cyclone reactor. *J Sol Energy Eng*, 2013, 135: 031003

- 17 Nesrin O, Karim I, Mariam A M. Kinetics and heat transfer analysis of carbon catalyzed solar cracking process. *Energy*, 2013, 55: 74–81
 - 18 Min-Hsiu C, Nesrin O, Gerald M. CFD and heat transfer analysis of vortex formation in a solar reactor. *Therm Sci Eng Appl*, 2014, 7: 041007
 - 19 Heiskanen L. A study on rate correlations of gasification reactions. Bachelor Dissertation. Lappeenranta: Lappeenranta University of Technology, 2011
 - 20 Z'graggen A. Solar gasification of carbonaceous materials reactor design, modeling and experimentation. Doctor Dissertation. Zürich: ETH, 2008
-

补充材料

附录 A 术语表

本文以上补充材料见网络版 csb.scichina.com. 补充材料为作者提供的原始数据, 作者对其学术质量和内容负责.

Summary for “太阳能 CO₂ 煤气化反应器玻璃窗清洁度的数值模拟”

Numerical simulation of cleanliness of glass window in solar CO₂ coal gasification reactor

Shaomeng Dai^{1,2}, Zheshao Chang^{1*}, Chun Chang¹ & Xin Li^{1,2*}

¹ Institute of Electrical Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;

² University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

* Corresponding authors, E-mail: changzheshao@mail.iee.ac.cn; drlixin@mail.iee.ac.cn

Solar CO₂ coal gasification technology uses highly concentrated solar radiation to generate high temperature above 1000°C, so that the pulverized coal particles can react with CO₂ to generate CO in the solar reactor. Compared with common industrial coal gasification technology, solar CO₂ coal gasification has the advantages of reducing CO₂ emissions and producing high quality and high purity gaseous fuels in a clean and energy efficient manner. Solar coal gasification stores intermittent and unstable solar energy in clean fuels, which has promising application and has attracted the interest of many researchers around the world.

As the core component of solar thermochemical, solar reactors are mainly divided into direct and indirect types. The direct reactor is easy to realize and has many advantages, which is convenient for transport and liquid slagging. However, a major problem of the direct solar reactor is that coal particles may contaminate the reactor glass window which will affect the efficiency and safety of the reactor. So keeping the reactor quartz glass clean is the key to increase reactor efficiency and safety. The reactor windows are typically purged with argon to avoid contamination by coal ash and tar, but this also results in reducing thermal efficiency and difficulties of separating from the gas. In this paper, CO₂ gas is used as the reactant and also used to clean the quartz glass window in a solar gasification reactor.

This paper establishes a three dimensional mathematical model of a directly-irradiated cyclone-flow solar thermochemical reactor. UDF is used to realize the flux ellipsoid distribution and concentrating in fluent software. A gas-solid two-phase flow model is established and the participating media radiation and chemical reaction kinetic models of coal particles and gases are coupled by Euler-Lagrange method. The numerical results are validated by comparing with the experimental results of ETH cyclone reactor. Then the effect of CO₂ intake mass flow ratio and coal particle mass flow on the deposition of coal particles on the quartz glass window surface was studied.

The calculation results show that maintaining the glass window cleaning mainly depends on the intake mass flow ratio of the sweeping glass and the cavity. When the sweeping glass window intake CO₂ mass flow is too small, coal particles are easy to contaminate the glass. When the sweeping glass window intake CO₂ mass flow is too large, the molar ratio of CO₂ to coal particles will increase which reduce CO₂ conversion. The coal particle inlet CO₂ mass flow accounts for a small amount of total intake gas mass flow, mainly as a gas for transporting coal particles. When the molar ratio of CO₂ to coal particles is in the range of 1.3–1.8 and the mass flow rate of the cavity, sweeping glass and conveying coal particles takes the percentage of the total CO₂ intake mass flow rate in the range of 71.9%–78.2%, 15.7%–20.7% and 5%–10%, respectively, the glass window cleanliness is optimal. The increase of mass flow rate of coal particles (1.5×10^{-4} – 4×10^{-4} kg/s) can significantly reduce the molar ratio of CO₂ to coal particles, but the turbulence of coal particle trajectory will increase, which causes a small amount of coal particles to move toward the glass window through the opening aperture.

solar reactor, CO₂, coal gasification, glass window, coal particles deposition

doi: 10.1360/N972018-01090