

Математическое моделирование образования агломератов в реагирующей пористой среде с меняющейся проницаемостью

И. Г. Донской

Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, Иркутск, Россия

Контактный автор: Донской Игорь Г., e-mail: donskoy.chem@mail.ru

Поступила 26 сентября 2019 г., доработана 27 декабря 2019 г., принята в печать 13 января 2020 г.

При переработке низкосортных твердых топлив, таких как отходы и биомасса, часто возникают проблемы, связанные с агломерацией. В работе предложен один из вариантов модели спекания, в которой локальная проницаемость изменяется при нагреве из-за физико-химического процесса (плавления), а центры агломерации (частицы плавящегося материала) случайным образом распределяются в двумерной пористой среде. Относительно простая модель позволяет исследовать развитие термогидродинамических неоднородностей в участке пористой среды и оценивать его гидравлическое сопротивление при разной доле расплавленного материала.

Ключевые слова: фильтрация, тепломассоперенос, пористая среда, фазовый переход, агломерация, спекание.

Цитирование: Донской И.Г. Математическое моделирование образования агломератов в реагирующей пористой среде с меняющейся проницаемостью. Вычислительные технологии. 2020. 25(2): 22–35.

Введение

Проблемы термической утилизации отходов связаны с низкой эффективностью их горения. Высокая доля негорючих компонентов, влажность, механическая неустойчивость слоя приводят к высокому механическому недожогу и образованию вредных веществ. Для решения этих проблем необходимо исследовать теплофизические процессы в реагирующем слое.

Одними из основных компонентов отходов являются полимерные материалы, термическое разложение и горение которых может приводить к локальному снижению проницаемости слоя: из-за размягчения и плавления пластика на стадии прогрева, а также размягчения и плавления минеральной части на стадии интенсивного горения. Оба механизма схожи между собой. Из-за колебаний температуры в слое могут образовываться агломераты — спекшиеся куски топлива, которые выгорают намного медленнее, чем отдельные частицы. В ряде экспериментальных работ исследовалось образование агломератов при горении и газификации биомассы [1, 2], торфа [3, 4], пластиков [5].

Большой интерес представляет разработка математических моделей образования агломератов. В настоящей работе предполагается, что образование агломератов связано с течением пластической массы, которая заполняет порозное пространство в слое, что

приводит к нехватке газообразного окислителя в небольшой области слоя, ухудшению выгорания, снижению температуры и образованию застойных участков с пониженной проницаемостью [6]. Для исследования этих процессов используется математическое моделирование процессов переноса в пористых средах в двумерной постановке. Подобные математические модели предложены в работе [7] для слоевого сжигания отходов, в работах [8–11] для исследования термических режимов пористых сред со сложной геометрией и гравитационной конвекцией.

Обычно образование агломератов рассматривается как процесс, который протекает во всей области, где достигнута температура физико-химического превращения. В настоящей работе вводится дополнительное условие: очаги агломерации располагаются в слое неоднородно и реагируют на внешний нагрев также неоднородно.

1. Основные уравнения и описание алгоритма

Рассматривается двумерная пористая среда (слой топлива), через которую протекает многокомпонентный газ. Температуры газа и твердой фазы могут различаться. Греющий газ (воздух) подается через нижнюю границу участка ($z = 0$) и покидает его через верхнюю границу ($z = Z$). Левая ($y = 0$) и правая ($y = Y$) границы непроницаемы. На поверхности частиц протекает одностадийный физико-химический процесс. Система уравнений для мольной концентрации l -го компонента C_l , температуры газа T_g и пористой фазы T_s записывается следующим образом:

$$\Pi \frac{\partial C_l}{\partial t} = \Pi \frac{\partial}{\partial z} \left(D_g \frac{\partial C_l}{\partial z} \right) + \Pi \frac{\partial}{\partial y} \left(D_g \frac{\partial C_l}{\partial y} \right) - \Pi U \frac{\partial C_l}{\partial z} - \Pi V \frac{\partial C_l}{\partial y}, \quad (1)$$

$$(1 - \Pi) c_s \rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = (1 - \Pi) \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) + (1 - \Pi) \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) + \alpha S (T_g - T_s) + Q_m r_m, \quad (2)$$

$$\Pi c_g \rho_g \frac{\partial T_g}{\partial t} = \Pi \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial z} \right) + \Pi \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial y} \right) - \alpha S (T_g - T_s) - \Pi c_g \rho_g U \frac{\partial T_g}{\partial z} - \Pi c_g \rho_g V \frac{\partial T_g}{\partial y}, \quad (3)$$

$$U = -\frac{k_D}{\mu} \frac{\partial P_g}{\partial z}, \quad V = -\frac{k_D}{\mu} \frac{\partial P_g}{\partial y}, \quad (4)$$

$$P_g = \frac{\rho_g R_g T_g}{M_g} = \sum_l C_l R_l T_g. \quad (5)$$

Здесь y и z — пространственные координаты; t — время; Π — объемная пористость; U и V — линейная скорость газа в направлениях z и y соответственно, м/с; ρ — массовая плотность, кг·м⁻³; c — удельная теплоемкость, Дж/кг·К; λ — коэффициент теплопроводности, Вт·м⁻¹·К⁻¹; α — коэффициент межфазного теплообмена, Вт·м⁻²·К⁻¹; S — межфазная поверхность в единице объема, м⁻¹; r — скорость физико-химического процесса, кг/с; k_D — проницаемость, м²·с⁻¹; μ — динамическая вязкость газа; P — давление газа, Па; R_g — универсальная газовая постоянная; M_g — молярная масса газа; Q_m — тепловой эффект плавления вещества, Дж/кг.

Эти уравнения решаются при следующих граничных условиях: для давления на проточных границах области устанавливаются условия первого рода, для всех функций на боковых границах участка и на выходной проточной границе — граничные условия

второго рода. Для температуры газа и концентраций на входе устанавливаются условия Данквертса [12]. Давление и концентрации газообразных компонентов связаны между собой уравнением состояния (5): суммируя уравнения для всех концентраций C_l , можно получить уравнение на давление

$$P_g|_{z=Z} = P_0, \quad P_g|_{z=0} = P_0 + \Delta P, \quad (6)$$

$$\frac{\partial T_g}{\partial z}|_{z=Z} = 0, \quad \frac{\partial C_l}{\partial z}|_{z=Z} = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial T_g}{\partial y}|_{y=0} = \frac{\partial T_g}{\partial y}|_{y=Y} = 0, \quad (8)$$

$$\frac{\partial C_l}{\partial y}|_{y=0} = \frac{\partial C_l}{\partial y}|_{y=Y} = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial P_g}{\partial y}|_{y=0} = \frac{\partial P_g}{\partial y}|_{y=Y} = 0, \quad (10)$$

$$c_{p,g} T_g^{in} \rho_g U_{z=0} = c_{p,g} T_g \rho_g U_{z=0} - \Pi \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial z}|_{z=0}, \quad (11)$$

$$C_l^{in} U_{z=0} = C_l U_{z=0} - \Pi D_g \frac{\partial C_l}{\partial z}|_{z=0}. \quad (12)$$

Коэффициенты теплопроводности, диффузии и вязкости зависят от температуры и давления следующим образом:

$$\lambda_g = a_1 + b_1 \sqrt{T_g}, \quad (13)$$

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T_g}{T_0} \right)^{2/3}, \quad (14)$$

$$\lambda_s = a_2 + b_2 T_s + c_2 T_s^3, \quad (15)$$

$$D_g = D_g^0 \left(\frac{T_g}{T_0} \right)^{3/2} \frac{P_0}{P_g}. \quad (16)$$

В уравнениях (13)–(16) используются типичные степенные зависимости коэффициентов переноса и вязкости от температуры и давления [13]. Кубический член в (15) дает поправку на перенос теплоты излучением [14]. Перепад давлений ΔP подбирается таким образом, чтобы обеспечить достижимые в экспериментах скорости течения газа через холодную пористую среду (порядка 1–10 см/с). В данной работе предполагается, что эта величина поддерживается постоянной, однако можно поставить задачу в более общем виде, когда перепад давлений будет функцией времени или характеристик течения в выбранной области, например температурных показаний или расхода на выходе из слоя (таким образом можно строить способы управления системой [15]).

Особенностью рассматриваемой задачи является случайное дискретное расположение очагов агломерации (например, частиц пластика). Для заданного уровня концентрации w_P формируется эквивалентный двумерной сетке массив нулей и единиц, такой, чтобы среднее значение всех элементов массива было равно w_P . Ячейки, содержащие единицу, изменяют свой локальный коэффициент проницаемости при нагреве до температуры плавления. Считаем, что кинетика плавления определяется скоростью подвода теплоты:

$$r_m(T \geq T_m) = \frac{\sum_i q_i}{|Q_m|} \left(\sum_i q_i > 0 \right). \quad (17)$$

Здесь r_m — массовая скорость плавления, кг/с ($r_m(T < T_m) = 0$); q_i — тепловой поток между текущей ячейкой и i -й соседней ячейкой, Вт. На каждом шаге составляется баланс между твердой и расплавленной фазами, в результате чего находим степень фазового превращения вещества в ячейке X :

$$\frac{\partial X}{\partial t} = -\frac{r_m}{(1 - \Pi)\rho_P\Delta V}, \quad X > 0. \quad (18)$$

Здесь ρ_P — плотность плавящегося компонента, кг/м³; ΔV — объем расчетного элемента. В начальный момент времени $X = 1$ во всех расчетных элементах, в которых находятся центры агломерации. Поставленная таким образом задача может быть названа двумерной задачей Стефана с дискретными стоками. Локальный коэффициент проницаемости в элементах с очагами агломерации k_D зависит от X следующим образом:

$$\lg(k_D) = X \lg(k_{D,\min}) + (1 - X) \lg(k_{D,\max}). \quad (19)$$

Граничные значения $k_{D,\min}$ и $k_{D,\max}$ различаются на несколько порядков, что позволяет реалистично моделировать изменение проницаемости при критических явлениях [16]. Коэффициенты межфазного переноса и проницаемость связаны со средним размером частиц d_p эмпирическими соотношениями из работ [17]. Геометрические и физические постоянные задачи приведены в таблице.

Поскольку плавящиеся компоненты распределены в пористой среде случайным образом, перед нами задача о перколяции в стохастической пористой среде [18, 19]. При перемешивании сыпучих компонентов плавящиеся частицы распределяются среди термически устойчивых. При нагревании фильтрующимся газом эти частицы размягчаются, заполняют пустоты и вспучиваются, блокируя пористые каналы между частицами

Численные значения коэффициентов / Values of coefficients

Величина	Обозначение	Размерность	Значение
Высота слоя	Z	м	0.25
Ширина слоя	Y	м	0.15
Средний размер частиц	d_p	м	0.01
Температура греющего газа	T^{in}	К	600
Проницаемость исходного материала	$k_{D,\max}$	м ² /с	$3 \cdot 10^{-6}$
Проницаемость расплавленного материала	$k_{D,\min}$	м ² /с	$3 \cdot 10^{-10}$
Теплота плавления	Q_m	Дж/кг	$-1 \cdot 10^5$
Порозность слоя	Π	—	0.4
Начальная температура	T_0	К	273
Коэффициент в (16)	D_g^0	м ² /с	$1.8 \cdot 10^{-5}$
Коэффициент в (13)	a_1	Вт/м/К	0.02
Коэффициент в (13)	b_1	Вт/м/К ²	$5 \cdot 10^{-6}$
Коэффициент в (15)	a_2	Вт/м/К	0.15
Коэффициент в (15)	b_2	Вт/м/К ²	$5 \cdot 10^{-6}$
Коэффициент в (15)	c_2	Вт/м/К ⁴	$1.8 \cdot 10^{-9}$
Коэффициент в (14)	μ_0	Па с	$1.7 \cdot 10^{-5}$
Давление на выходе из слоя	P_0	Па	101325

(или внутри них) [20]. В результате проницаемость пористой среды имеет сложный характер, однако усредненные по разным конфигурациям характеристики течения могут иметь достаточно четкие зависимости от содержания плавящегося вещества. Эта задача и будет исследована ниже для небольшого числа примеров.

Численный алгоритм решения системы уравнений составлен на основе работ [7, 9, 21–23]. Для дискретизации используется равномерная сетка. Двумерная задача расщепляется на совокупность одномерных в обоих направлениях. Решение одномерных задач переноса осуществляется путем расщепления по физическим процессам: сначала решается задача пьезопроводности в пористой среде; затем решается задача диффузии-конвекции при заданном поле скоростей и определяются материальные потоки; после этого решается задача теплопроводности с учетом переноса теплоты веществом. При решении подзадач на распределение давления и конвективный перенос вещества температурное поле не меняется. В качестве первого приближения используется распределение температуры с предыдущей итерации T^{k-1} . После решения подзадачи на перенос теплоты получается новое распределение температуры T^* , которое опять используется для уточнения поля давления. Переход к следующему временному шагу происходит тогда, когда этот цикл приводит к незначительно меняющемуся распределению T^* , которое и считается искомым решением T^k .

Переменными задачи являются температура, давление и состав газа, полнота превращения плавящегося компонента. Предполагается, что в начальный момент эти величины равномерно распределены по расчетной области. Динамика их изменения определяется уравнениями (1)–(3) с граничными условиями (6)–(12). Для численного решения производятся дискретизация этих уравнений на равномерной сетке и расщепление по направлениям переноса: сначала решаются одномерные задачи в направлении y (по индексам j), затем по направлению z (по индексам i):

$$\begin{aligned} T_j^k = & T_j^{k-1} + \frac{\tau \lambda_{j-1,j} S_{j-1,j}}{c_{p,j} m_j \Delta y} (T_{j-1}^k - T_j^k) + \frac{\tau \lambda_{j,j+1} S_{j,j+1}}{c_{p,j} m_j \Delta y} (T_{j+1}^k - T_j^k) + \\ & + \delta_{j-1,j} \frac{\Delta \tau \rho_{j-1}^g S_{j-1,j}}{c_{p,j} m_j} V_{j-1,j} T_{j-1}^k - (1 - \delta_{j-1,j}) \frac{\tau \rho_j^g S_{j-1,j}}{c_{p,j} m_j} V_{j-1,j} T_j^k - \\ & - \delta_{j,j+1} \frac{\tau \rho_j^g S_{j,j+1}}{c_{p,j} m_j} V_{j,j+1} T_j^k + (1 - \delta_{j,j+1}) \frac{\tau \rho_{j+1}^g S_{j,j+1}}{c_{p,j} m_j} V_{j,j+1} T_{j+1}^k + \tau Q_m r_m^*, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} T_i^k = & T_i^{k-1} + \frac{\tau \lambda_{i-1,i} S_{i-1,i}}{c_{p,i} m_i \Delta z} (T_{i-1}^k - T_i^k) + \frac{\tau \lambda_{i,i+1} S_{i,i+1}}{c_{p,i} m_i \Delta z} (T_{i+1}^k - T_i^k) + \\ & + \delta_{i-1,i} \frac{\tau \rho_{i-1}^g S_{i-1,i}}{c_{p,i} m_i} U_{i-1,i} T_{i-1}^k - (1 - \delta_{i-1,i}) \frac{\tau \rho_i^g S_{i-1,i}}{c_{p,i} m_i} U_{i-1,i} T_i^k - \\ & - \delta_{i,i+1} \frac{\tau \rho_i^g S_{i,i+1}}{c_{p,i} m_i} U_{i,i+1} T_i^k + (1 - \delta_{i,i+1}) \frac{\tau \rho_{i+1}^g S_{i,i+1}}{c_{p,i} m_i} U_{i,i+1} T_{i+1}^k + \tau Q_m r_m^*. \end{aligned} \quad (21)$$

Для лучшей аппроксимации источникового слагаемого используется многошаговая схема [24–26]. Задача о плавлении выделяется из уравнений переноса: в уравнении (2) источниковый член r_m^* оценивается на временном шаге $\tau/2$ перед расчетом по каждому

направлению из уравнения (17). В уравнениях (19) и (20) скорость движения газа через границу, разделяющую две соседние ячейки, определяется выражениями

$$U_{i,i+1} = \left(\frac{\mu_i \Delta z}{2k_{D,i}} + \frac{\mu_{i+1} \Delta z}{2k_{D,i+1}} \right)^{-1} (P_i - P_{i+1}), \quad (22)$$

$$V_{j,j+1} = \left(\frac{\mu_j \Delta y}{2k_{D,j}} + \frac{\mu_{j+1} \Delta y}{2k_{D,j+1}} \right)^{-1} (P_j - P_{j+1}). \quad (23)$$

Переменная $\delta_{i,i+1} = \max[0, \text{sign}(U_{i,i+1})]$ в уравнениях (19) и (20) определяет направление потока [16]. Коэффициенты в уравнениях на каждом шаге считаются постоянными, а градиенты неизвестных функций связаны между собой в уравнениях (11) и (12), поэтому для корректировки их значений проводится согласование решений всех подзадач (перенос по направлениям и физико-химический процесс) методом простой итерации. Условием остановки служит близость двух последовательно полученных приближений для температурных полей в пределах 1 град. При расчетах использовались следующие значения шагов пространственной и временной сетки: $\Delta y = \Delta z = 5 \cdot 10^{-3}$ м, $\tau = 1 \cdot 10^{-2}$ с.

2. Результаты расчетов и их обсуждение

Рассмотрим изотермический участок пористой среды с размерами 25×15 см. Порозное пространство наполнено газом с той же температурой, что и твердая фаза, при атмосферном давлении. Характерный средний размер частиц d_p равен 1 см. Снизу подается горячий газ при температуре 600 К со скоростью порядка 10 см/с (на холодное сечение), что достигается при $\Delta P = 10$ Па (влияние естественной конвекции считаем незначительным). Прогрев твердой фазы вызывает физико-химические превращения, поэтому путь газа через участок становится извилистым: эффективное сечение уменьшается, расход газа через участок (при постоянном перепаде давления) падает. При этом интересны не только стационарные режимы фильтрации, но и динамика течения при взаимодействии теплопереноса с физико-химическим превращением. Условие протекания фазового перехода выражается следующим образом: размягчение плавящегося материала начинается ступенчато при температуре $T_m = 473$ К, тепловой эффект Q_m слабый эндотермический (-100 кДж/кг). В качестве греющего газа взят воздух ($l = O_2, N_2$).

Пример расчета представлен на рис. 1, где приведены мгновенные поля температуры газа и локальной проницаемости после 1000 с от начала прогрева. Даже при небольшой доле очагов агломерации течение газа становится неоднородным по сечению. Точечные минимумы проницаемости формируют разрывную форму фронта прогрева. Случайный характер расположения очагов агломерации приводит к тому, что они могут блокировать часть сечения не только при соседнем расположении на одной высоте, но и выстраиваясь друг за другом (довольно близко, чтобы зазоры между ними оставались достаточно узкими). Такая картина характерна для двумерного течения, однако качественно она, скорее всего, будет наблюдаться и для трехмерного случая.

В результате расчетов обнаружены неоднородности, напоминающие “вязкие пальцы”, характерные для неустойчивости Саффмана—Тэйлора. Подобные явления наблюдаются также для фронта горения в пористых и стохастических средах [27, 28].

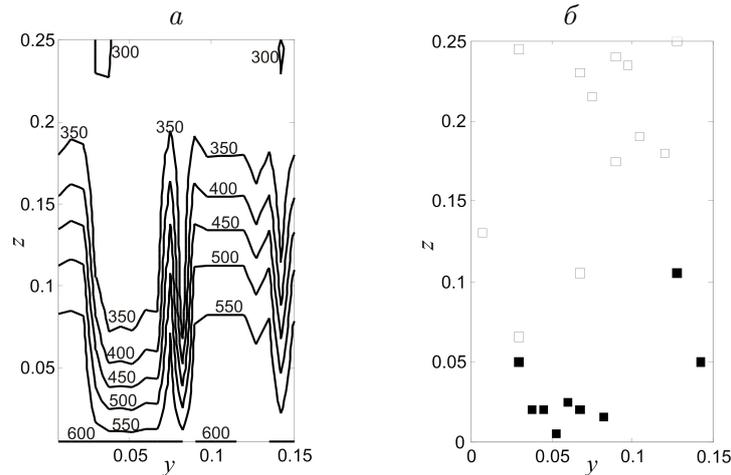


Рис. 1. Расчетное поле температур (а) и расплавленные частицы плавящегося компонента (обозначены черными маркерами) при $w_P = 0.02$ (б)

Fig. 1. Computational distribution of temperature (а) and melting component particles (marked by black squares) at $w_P = 0.02$ (б)

Различие заключается в том, что в представленном здесь случае неоднородности связаны не с внутренними динамическими закономерностями фильтрационного течения, а с разрывностью локальной проницаемости k_D , которая, в свою очередь, определяется случайным распределением очагов агломерации. Такая стохастичность, однако, весьма характерна для ряда интересных с практической точки зрения процессов, например, связанных с энергетической и технологической переработкой низкосортных топлив (биомассы, твердых бытовых отходов).

При горении смесей с центрами агломерации эти неоднородности генерируют термогидродинамические неустойчивости, которые наблюдаются в виде прогаров и горячих пятен [29]. Эти явления приводят к неэффективному горению и, помимо прочего, могут вызывать образование вредных поллютантов (таких как, например, ароматические продукты термоллиза и неполного окисления синтетических полимеров [30]). Естественно, что в зависимости от реализовавшейся случайной конфигурации можно получить разные варианты развития течения.

Основным показателем, который указывает на спекание слоя, является снижение расхода газа через слой при постоянном перепаде давления. Поэтому далее нас будет интересовать суммарный расход газа через верхнюю границу. Таким образом, развитие сложного двумерного течения можно свести (в некотором приближении) к динамике одной величины (представляющей конкретный интерес). На рис. 2 показаны кривые изменения суммарного расхода газа G_{out} от времени: пунктирные линии соответствуют разным случайным конфигурациям. Общий тренд к уменьшению расхода со временем связан с прогревом пористой среды: из уравнения для коэффициента вязкости μ следует, что при прогреве газа от 300 до 600 К его вязкость возрастет в 1.5 раза (во столько же раз уменьшится коэффициент в уравнении Дарси), при этом плотность уменьшится в два раза. Таким образом, даже при постоянной проницаемости среды после полного прогрева расход газа должен уменьшиться в три раза: именно такая тенденция наблюдается в расчетах. Наличие очагов агломерации дополнительно уменьшает расход газа, поэтому основной интерес представляет не столько абсолютное снижение расхода, сколько относительное (по сравнению с расходом газа G_0 через участок с $w_P = 0$).

Из рис. 2 видно, что начальный участок (порядка первых 100 с) одинаков для всех вариантов: температура пористой среды еще не достигает температуры размягчения. Затем в зависимости от того, насколько близко располагаются очаги агломерации к нижней границе участка, проницаемость с той или иной скоростью уменьшается: в некоторых случаях ступенчатое падение расхода ощущается уже через 500 с, в других сохраняет гладкий вид почти до конца прогрева участка. Однако после многократных численных экспериментов можно получить средние характеристики течения (сплошная кривая на рис. 2) и сравнить с вариантом без очагов агломерации. Такое сравнение приведено на рис. 3, где представлена динамика расходов на верхней границе участка, отнесенных к соответствующим расходам с нулевым содержанием плавящегося мате-

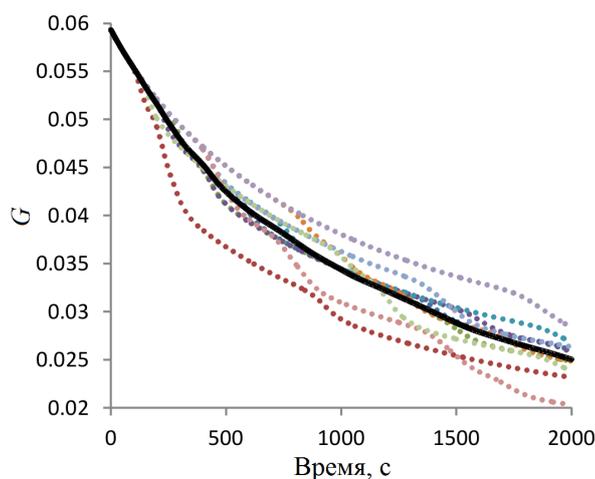


Рис. 2. Динамика расхода газа, протекающего через участок пористой среды, при $w_P = 0.02$. Пунктирные линии — G для отдельных конфигураций; сплошная линия — усредненный расход $\langle G \rangle$

Fig. 2. Dynamics of gas flow through porous medium at $w_P = 0.02$. Dashed lines — G for different configurations; solid line — averaged gas flow $\langle G \rangle$

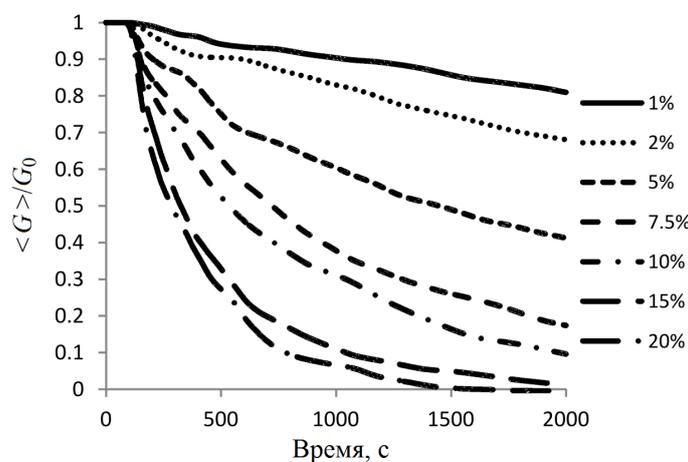


Рис. 3. Динамика усредненного относительного расхода газа ($\langle G \rangle / G_0$) при разных значениях w_P

Fig. 3. Dynamics of specific averaged gas flow ($\langle G \rangle / G_0$) for different values of w_P

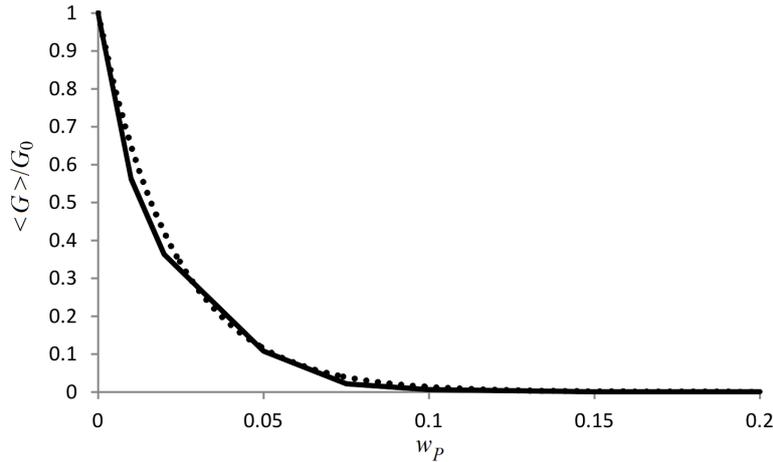


Рис. 4. Стационарный относительный расход газа ($\langle G \rangle / G_0$) при разных значениях w_P : сплошная линия — результаты расчетов, пунктирная — аппроксимация $f = e^{-43.28w_P}$
 Fig. 4. Stationary averaged gas flow ($\langle G \rangle / G_0$) for different values of w_P : solid line — computational results; dashed line — approximation $f = e^{-43.28w_P}$

риала ($\langle G \rangle / G_0$). В зависимости от доли плавящегося материала можно наблюдать переход от плавного, почти линейного, уменьшения расхода со временем (при долях 1–5 %) к резкому, близкому к экспоненциальному (при долях 10–20 %).

Характеристики стационарных режимов были получены путем численных расчетов с помощью того же численного алгоритма на установление. Можно построить зависимость суммарного расхода на верхней границе от доли плавящегося материала (рис. 4): эта зависимость имеет участок резкого падения до 5–7 %, затем падение становится более пологим, и при 10–20 % плавящегося материала расход газа уменьшается практически до нуля. Зависимость расхода от доли плавящегося материала оказывается очень близкой к e^{-bw_P} при довольно большом показателе ($b = 43$), подобные эффекты наблюдаются в стохастических средах (см., например [31]). Коэффициент детерминации R^2 составил 0.95, что говорит о достаточно хорошей аппроксимации в рассмотренном диапазоне w_P . R^2 определялся по выборочной оценке дисперсий:

$$R^2 = 1 - \frac{S_{appr}^2}{S_G^2} = 1 - \frac{\sum_i (G_i - G_i^{appr})^2}{\sum_i (G_i - G^{mean})^2}, \quad (24)$$

где S_{appr}^2 — дисперсия ошибки аппроксимации; S_G^2 — дисперсия выборки значений расхода G .

Экспериментальные работы [32–35] показывают, что при слоевом сжигании полимерсодержащих отходов доля пластика 20 % часто является пограничной между областями стабильных и нестабильных режимов горения. Полученная в настоящей работе оценка (5–10 %) оказывается заниженной, что может быть связано с грубостью двумерной модели: в реальных энергетических устройствах фильтрация протекает в трех измерениях. Интересен, однако, сам факт существования разных динамических режимов фильтрации в таких системах. Возможно, что дальнейшее расширение модели (дополнение до трехмерной геометрии, добавление источников теплоты за счет окисления и т. д.) даст более точную картину рассматриваемых явлений.

Выводы

Предложена модель двумерной неизотермической фильтрации в стохастической пористой среде. Проведено численное исследование изменения проницаемости в слое полимерсодержащих гранулированных материалов. Плавление учитывается в модели как уменьшение локальной проницаемости в выбранном температурном диапазоне. Результаты вариантных расчетов позволяют оценить влияние доли плавящегося компонента w_p на режим фильтрации. Анализ расчетных зависимостей показывает существование диапазона w_p (между 5 и 10 %), в котором наблюдается резкое снижение расхода газа через участок пористой среды. Дальнейшие исследования могут быть связаны с реализацией трехмерной задачи и детализацией описания физико-химических процессов (пиролиз, горение и т. д.).

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-08-00744) с использованием оборудования центра коллективного пользования ИСЭМ СО РАН “Высокотемпературный контур”.

Список литературы

- [1] Ong Z., Cheng Y., Maneerung T., Yao Z., Tong Y.W., Wang C.-H., Dai Y. Co-gasification of woody biomass and sewage sludge in a fixed-bed downdraft gasifier. American Institute of Chemical Engineers J. 2015; 61(8):2508–2521. DOI:10.1002/aic.14836
- [2] Madadian E. Experimental observation on downdraft gasification for different biomass feedstocks. Gasification for Low-Grade Feedstock. InTech. 2018:79–93. DOI:10.5772/intechopen.77119
- [3] Цветков М.В., Зюкин И.В., Фрейман В.М., Салганская М.В., Цветкова Ю.Ю. Возможные пути предотвращения шлакования золы при газификации торфа в режиме фильтрационного горения. Журнал прикладной химии. 2017; 90(10):1392–1398.
- [4] Siddiqui H., Thengane S.K., Sharma S., Mahajani S.M. Revamping downdraft gasifier to minimize clinker formation for high-ash garden waste as feedstock. Bioresource Technology. 2018; (266):220–231. DOI:10.1016/j.biortech.2018.06.086
- [5] Bhoi P.R., Huhnke R.L., Kumar A., Indrawan N., Thapa S. Co-gasification of municipal solid waste and biomass in a commercial scale downdraft gasifier. Energy. 2018; (163):513–518. DOI:10.1016/j.energy.2018.08.151
- [6] Allesina G., Pedrazzi S., Tartarini P. Modeling and investigation of the channelling phenomenon in downdraft stratified gasifiers. Bioresource Technology. 2013; (146):704–712. DOI:10.1016/j.biortech.2013.07.132
- [7] Yang Y.B., Swithenbank J. Mathematical modelling of particle mixing effect on the combustion of municipal solid wastes in a packed-bed furnace. Waste Management. 2008; (28):1290–1300. DOI:10.1016/j.wasman.2007.04.012
- [8] Lutsenko N.A. Numerical model of two-dimensional heterogeneous combustion in porous media under natural convection or forced filtration. Combustion Theory and Modelling. 2018; 22(2):359–377. DOI:10.1080/13647830.2017.1406617
- [9] Левин В.А., Луценко Н.А. Численное моделирование двумерных нестационарных течений газа через пористые тепловыделяющие элементы. Вычислительные технологии. 2006; 11(6):44–58.

- [10] **Openyshev P.V., Sheremet M.A.** Influence of a porous insert on the fluid flow inside the gasifier shaft. *Key Engineering Materials*. 2016; (685):235–239. DOI:10.4028/www.scientific.net/KEM.685.235
- [11] **Lutsenko N.A., Fetsov S.S.** Numerical model of time-dependent gas flows through bed of granular phase change material. *Intern. J. of Computational Methods*. 2019; 16(3):1950010. DOI:10.1142/S0219876219500105
- [12] **Теплицкий Ю.С., Ковенский В.И.** О постановке граничных условий и условий сопряжения для задач теплопереноса в зернистых слоях на основе двухтемпературной модели. *Инженерно-физический журнал*. 2006; 79(6):98–106.
- [13] **Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.** Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит-ры; 1961: 931.
- [14] **Ковенский В.И., Теплицкий Ю.С.** О теплопроводности зернистого слоя. *Инженерно-физический журнал*. 2008; 81(5):956–962.
- [15] **Зароднюк М.С., Свищев Д.А., Донской И.Г., Зароднюк Т.С.** Постановка задачи оптимального управления газогенераторной установкой. *Материалы XI Междунар. конф. по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2016)*, 25–31 мая 2016 г., Алушта. М.: Изд-во МАИ; 2016:515–516.
- [16] **Misyura S.Y., Donskoy I.G.** Dissociation of natural and artificial gas hydrate. *Chemical Engineering Science*. 2016; (148):65–77. DOI:10.1016/j.ces.2016.03.021
- [17] **Аэров М.Э., Тодес О.М., Наринский Д.А.** Аппараты со стационарным зернистым слоем: Гидравлические и тепловые основы работы. Л.: Химия; 1979: 176.
- [18] **Naraghi M.E., Javadpour F.** A stochastic permeability model for the shale-gas systems. *International J. of Coal Geology*. 2015; (140):111–124. DOI:10.1016/j.coal.2015.02.004
- [19] **Ibrahima F., Tchelepı H.A., Meyer D.W.** An efficient distribution method for nonlinear two-phase flow in highly heterogeneous multidimensional stochastic porous media. *Computational Geosciences*. 2018; 22(1):389–412. DOI:10.1007/s10596-017-9698-0
- [20] **Zhou C., Zhang Q., Arnold L., Yang W., Blasiak W.** A study of the pyrolysis behaviors of pelletized recovered municipal solid waste fuels. *Applied Energy*. 2013; (107):173–182. DOI:10.1016/j.apenergy.2013.02.029
- [21] **Патанкар С.** Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат; 1984: 152.
- [22] **Di Blasi C.** Mechanisms of two-dimensional smoldering propagation through packed fuel bed. *Combustion Science and Technology*. 1995; 106(1-3):103–124. DOI:10.1080/00102209508907769
- [23] **Донской И.Г.** Математическое моделирование термического разложения древесных частиц в продуваемом слое. *Вычислительные технологии*. 2018; 23(6):14–24. DOI:10.25743/ICT.2018.23.6.003
- [24] **Strang G.** On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM J. Numer. Anal.* 1968; 5(3):506–517. DOI:10.1137/0705041
- [25] **Марчук Г.И.** Методы расщепления для решения нестационарных задач. *Журн. вычисл. математики и матем. физики*. 1995; 35(6):843–849.
- [26] **Ren Z., Xu C., Lu T., Singer M.A.** Dynamic adaptive chemistry with operator splitting schemes for reactive flow simulations. *J. of Computational Physics*. 2014; (263):19–36. DOI:10.1016/j.jcp.2014.01.016
- [27] **Алдушин А.П., Ивлева Т.П.** Моделирование гидродинамической неустойчивости фильтрационного режима распространения фронта горения в пористой среде. *Физика горения и взрыва*. 2015; 51(1):125–134.
- [28] **Гринчук П.С.** Горение гетерогенных систем со стохастической пространственной структурой вблизи пределов распространения. *Инженерно-физический журнал*. 2013; 86(4):819–831.

- [29] **Duffy N.T.M., Eaton J.A.** Investigation of factors affecting channelling in fixed-bed solid fuel combustion using CFD. *Combustion and Flame*. 2013; 160(10):2204–2220. DOI:10.1016/j.combustflame.2013.04.015
- [30] **Castaldi M., van Deventer J., Lavoie J.M., Legrand J., Nzihou A., Pontikes Y., Py X., Vandecasteele C., Vasudevan P.T.** Progress and prospects in the field of biomass and waste to energy and added-value materials. *Waste and Biomass Valorization*. 2017; 8(6): 1875–1884. DOI:10.1007/s12649-017-0049-0
- [31] **Xin J.** Front propagation in heterogeneous media. *SIAM Review*. 2000; 42(2):161–230. DOI:10.1137/S0036144599364296
- [32] **Garcia-Bacaioca P., Mastral J.F., Ceamanos J., Berruero C., Serrano S.** Gasification of biomass/high density polyethylene mixtures in a downdraft gasifier. *Bioresource Technology*. 2008; (99):5485–5491. DOI:10.1016/j.biortech.2007.11.003
- [33] **Ouadi M., Brammer J.G., Kay M., Hornung A.** Fixed bed downdraft gasification of paper industry wastes. *Applied Energy*. 2013; (103):692–699. DOI:10.1016/j.apenergy.2012.10.038
- [34] **Салганская М.В., Глазов С.В., Салганский Е.А., Жолудев А.Ф.** Фильтрационное горение древесного угля с полиэтиленом. *Химическая физика*. 2010; 29(11):55–61.
- [35] **Салганская М.В., Глазов С.В., Салганский Е.А., Жолудев А.Ф., Стесик Л.Н.** Фильтрационное горение систем с полимерными материалами. *Химическая физика*. 2013; 32(3):57–61.

Mathematical modelling of the agglomeration in a reactive porous medium with variable permeability

DONSKOY IGOR G.

Melentiev Institute of Energy Systems SB RAS, 664033, Irkutsk, Russia

Corresponding author: Donskoy Igor G., e-mail: donskoy.chem@mail.ru

Received September 26, 2019, revised December 27, 2019, accepted January 13, 2020

Abstract

Thermal processing of waste is usually carried out in fixed-bed reactors. Complex thermochemical behavior of individual components can lead to a decrease in technical and environmental efficiency. One of the problems is the bed agglomeration and formation of zones with decreasing permeability. The paper proposes a method of numerical simulation of porous media with physicochemical processes, which change permeability. Initial formulation proposes this process to be considered as melting of distributed particles in a stochastic media. The melting rate is controlled by heating of the selected element, and its local permeability changes during a phase transition. To solve this problem, numerical algorithm is developed on the basis of splitting methods. This algorithm was used to find a solution for system of non-stationary partial differential equations in two-dimensional case. The data on multiple calculations for different configurations are averaged to compare modelling results. The simulation results show that increasing the fraction of particles of the melting component leads to the significant change of the dynamic and stationary filtration

regimes. The reduction in stationary flow rate is exponential function of the fraction of the melting particles. The dynamics of gas flow is also sensitive to the melting particles fraction, within the range of 5–10% there is a rather sharp transition from a gradual (almost linear) decrease of flow in time to a sharp one, which is close to exponential behaviour. The resulting calculations for the critical fraction are compared with the measured data published for the case of combustion of mixtures with sintering fuel particles (polymers). Further work will address the modification of the model to describe waste incineration, namely, taking into account the pyrolysis and oxidation processes, three-dimensional formulation, etc.

Keywords: biomass, solid fuel, single particle, fixed bed, pyrolysis, transfer processes, agglomeration, clinkering.

Citation: Donskoy I.G. Mathematical modelling of the agglomeration in a reactive porous medium with variable permeability. Computational Technologies. 2020; 25(2):22–35. (In Russ.)

Acknowledgements. This work was supported by Russian Fund for Basic Research (project No. 19-08-00744) and was carried out using equipment of the multi-access scientific centre “High Temperature Circuit”.

References

1. Ong Z., Cheng Y., Maneerung T., Yao Z., Tong Y.W., Wang C.-H., Dai Y. Co-gasification of woody biomass and sewage sludge in a fixed-bed downdraft gasifier. *American Institute of Chemical Engineers J.* 2015; 61(8):2508–2521. DOI:10.1002/aic.14836
2. Madadian E. Experimental observation on downdraft gasification for different biomass feedstocks. *Gasification for Low-Grade Feedstock. InTech*, 2018:79–93. DOI:10.5772/intechopen.77119
3. Tsvetkov M.V., Zyukin I.V., Freiman V.M., Salganskaya M.V., Tsvetkova Y.Y. Possible ways to prevent ash slagging in peat gasification in the filtration combustion mode. *Russian J. of Applied Chemistry.* 2017; 90(10):1706–1711. DOI:10.1134/S1070427217100226
4. Siddiqui H., Thengane S.K., Sharma S., Mahajani S.M. Revamping downdraft gasifier to minimize clinker formation for high-ash garden waste as feedstock. *Bioresource Technology.* 2018; (266): 220–231. DOI:10.1016/j.biortech.2018.06.086
5. Bhoi P.R., Huhnke R.L., Kumar A., Indrawan N., Thapa S. Co-gasification of municipal solid waste and biomass in a commercial scale downdraft gasifier. *Energy.* 2018; (163):513–518. DOI:10.1016/j.energy.2018.08.151
6. Allesina G., Pedrazzi S., Tartarini P. Modeling and investigation of the channelling phenomenon in downdraft stratified gasifiers. *Bioresource Technology.* 2013; (146):704–712. DOI:10.1016/j.biortech.2013.07.132
7. Yang Y.B., Swithenbank J. Mathematical modelling of particle mixing effect on the combustion of municipal solid wastes in a packed-bed furnace. *Waste Management.* 2008; (28):1290–1300. DOI:10.1016/j.wasman.2007.04.012
8. Lutsenko N.A. Numerical model of two-dimensional heterogeneous combustion in porous media under natural convection or forced filtration. *Combustion Theory and Modelling.* 2018; 22(2):359–377. DOI:10.1080/13647830.2017.1406617
9. Levin V.A., Lutsenko N.A. Numerical modeling of two-dimensional time-dependent gas flow through porous heat-evolutional elements. *Computational Technologies.* 2006; 11(6):44–58. (In Russ.)
10. Openyshev P.V., Sheremet M.A. Influence of a porous insert on the fluid flow inside the gasifier shaft. *Key Engineering Materials.* 2016; (685):235–239. DOI:10.4028/www.scientific.net/KEM.685.235
11. Lutsenko N.A., Fetsov S.S. Numerical model of time-dependent gas flows through bed of granular phase change material. *Intern. J. of Comput. Methods.* 2019; 16(3):1950010. DOI:10.1142/S0219876219500105
12. Teplitskii Yu.S., Kovenskii V.I. Statement of boundary and conjugation conditions for problems of heat transfer in granular beds on the basis of a two-temperature model. *J. of Engineering Physics and Thermophysics.* 2006; 79(6):1147–1156. DOI:10.1007/s10891-006-0217-8
13. Hirschfelder J.O., Curtiss C.F., Bird R.B. *Molecular theory of gases and liquids.* New York: Wiley; 1954.
14. Kovenskii V.I., Teplitskii Yu.S. On the thermal conductivity of a blown granular bed. *J. of Engineering Physics and Thermophysics.* 2008; 81(5):998–1005. DOI:10.1007/s10891-009-0113-0

15. Zarodnyuk M.S., Svishchev D.A., Donskoy I.G., Zarodnyuk T.S. Formulation of the optimal control problem for gasifier unit. Proc. of XI Intern. Conf. on Non-equilibrium Processes in Nozzles and Jets (NPNJ'2016), 25–31 May 2016, Alushta. Moscow: MAI; 2016:515–516. (In Russ.)
16. Misyura S.Y., Donskoy I.G. Dissociation of natural and artificial gas hydrate. Chemical Engineering Science. 2016; (148):65–77. DOI:10.1016/j.ces.2016.03.021
17. Aerov M.E., Todes O.M., Narinskii D.A. Apparaty so statsionarnym zernistym sloem: Gidravlicheskie i teplovye osnovy raboty [Stationary granular beds: hydraulics and heat transfer]. Leningrad: Khimiya; 1979: 176. (In Russ.)
18. Naraghi M.E., Javadpour F. A stochastic permeability model for the shale-gas systems. Intern. J. of Coal Geology. 2015; (140):111–124. DOI:10.1016/j.coal.2015.02.004
19. Ibrahima F., Tchelepi H.A., Meyer D.W. An efficient distribution method for nonlinear two-phase flow in highly heterogeneous multidimensional stochastic porous media. Computational Geosciences. 2018; 22(1):389–412. DOI:10.1007/s10596-017-9698-0
20. Zhou C., Zhang Q., Arnold L., Yang W., Blasiak W. A study of the pyrolysis behaviors of pelletized recovered municipal solid waste fuels. Applied Energy. 2013; 107:173–182. DOI:10.1016/j.apenergy.2013.02.029
21. Patankar S.V. Numerical heat transfer and fluid flow. McGraw-Hill, Hemisphere Publishing Corporation; 1980: 197.
22. Di Blasi C. Mechanisms of two-dimensional smoldering propagation through packed fuel bed. Combustion Science and Technology. 1995; 106(1-3):103–124. DOI:10.1080/00102209508907769
23. Donskoy I.G. Mathematical modelling of woody particles pyrolysis in a fixed bed. Computational Technologies. 2018; 23(6):14–24. (In Russ.) DOI:10.25743/ICT.2018.23.6.003
24. Strang G. On the construction and comparison of difference schemes. SIAM J. Numer. Anal. 1968; 5(3):506–517. DOI:10.1137/0705041
25. Marchuk G.I. Splitting-up methods for non-stationary problems. Computat. Mathematics and Math. Physics. 1995; 35(6):667–671.
26. Ren Z., Xu C., Lu T., Singer M.A. Dynamic adaptive chemistry with operator splitting schemes for reactive flow simulations. J. of Computational Physics. 2014; (263):19–36. DOI:10.1016/j.jcp.2014.01.016
27. Aldushin A.P., Ivleva T.P. Simulation of the hydrodynamic instability of a filtration combustion wave in a porous medium. Combustion, Explosion, and Shock Waves. 2015; 51(1):107–115. DOI:10.1134/S0010508215010116
28. Grinchuk P.S. Combustion of heterogeneous systems with a stochastic spatial structure near the propagation limits. J. of Engineering Physics and Thermophysics. 2013; 86(4):875–887. DOI:10.1007/s10891-013-0907-y
29. Duffy N.T.M., Eaton J.A. Investigation of factors affecting channelling in fixed-bed solid fuel combustion using CFD. Combustion and Flame. 2013; 160(10):2204–2220. DOI:10.1016/j.combustflame.2013.04.015
30. Castaldi M., van Deventer J., Lavoie J.M., Legrand J., Nzihou A., Pontikes Y., Py X., Vandecasteele C., Vasuedevan P.T. Progress and prospects in the field of biomass and waste to energy and added-value materials. Waste and Biomass Valorization. 2017; 8(6):1875–1884. DOI:10.1007/s12649-017-0049-0
31. Xin J. Front propagation in heterogeneous media. SIAM Review. 2000; 42(2):161–230. DOI:10.1137/S0036144599364296
32. Garcia-Bacaioca P., Mastral J.F., Ceamanos J., Berruero C., Serrano S. Gasification of biomass/high density polyethylene mixtures in a downdraft gasifier. Bioresource Technology. 2008; (99):5485–5491. DOI:10.1016/j.biortech.2007.11.003
33. Ouadi M., Brammer J.G., Kay M., Hornung A. Fixed bed downdraft gasification of paper industry wastes. Applied Energy. 2013; (103):692–699. DOI:10.1016/j.apenergy.2012.10.038
34. Salganskaya M.V., Glazov S.V., Salganskii E.A., Zholudev A.F. Filtration combustion of charcoal-polyethylene systems. Russian J. of Physical Chemistry B. 2010; 4(6):928–933. DOI:10.1134/S1990793110060096
35. Salganskaya M.V., Glazov S.V., Salganskiy E.A., Zholudev A.F., Stesik L.N. Filtrational combustion of systems with polymeric materials. Khimicheskaya Fizika. 2013; 32(3):57–61. (In Russ.)