

LNG 低温闪蒸气动态吸脱附特性的格子玻尔兹曼模拟

王健虎,段钟弟,袁昱超,薛鸿祥

(上海交通大学 海洋工程国家重点实验室,上海 200240)

摘要:为研究 LNG 闪蒸气在低温储存环境下的吸/脱附特性及热效应,基于格子玻尔兹曼方法建立了多孔介质内闪蒸气流动传热传质的数值模型,并考虑闪蒸气在多孔介质表面的吸附作用和内部微晶孔扩散作用及传热效应,分析不同孔隙率多孔介质材料的闪蒸气低温吸附热力学特性。结果表明:闪蒸气的吸附作用使多孔介质温度明显升高,吸附速率与孔隙率呈负相关,吸附量和温度变化受孔隙率影响较小;环境热量驱动下闪蒸气从多孔介质中脱附,通过脱附吸热抵消了约 45% 的外部漏热侵入,且随着孔隙率增大闪蒸气脱附吸热效应增强。

关键词:液化天然气;闪蒸气;多孔介质;吸附;传热传质

中图分类号:TK221

文献标识码:A

DOI:10.16146/j.cnki.rndlgc.2023.01.017

[引用本文格式]王健虎,段钟弟,袁昱超,等. LNG 低温闪蒸气动态吸脱附特性的格子玻尔兹曼模拟[J]. 热能动力工程,2023, 38(1):137-146. WANG Jian-hu, DUAN Zhong-di, YUAN Yu-chao, et al. Lattice Boltzmann simulation of dynamic adsorption and desorption characteristics of LNG boil-off gas at low temperature[J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and Power, 2023, 38(1): 137-146.

Lattice Boltzmann Simulation of Dynamic Adsorption and Desorption Characteristics of LNG Boil-off Gas at Low Temperature

WANG Jian-hu, DUAN Zhong-di, YUAN Yu-chao, XUE Hong-xiang

(State Key Laboratory of Ocean Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai, China, Post Code:200240)

Abstract: To investigate the adsorption/desorption characteristics and the thermal effects of liquefied natural gas (LNG) boil-off gas in low-temperature storage environment, a numerical model for boil-off gas heat and mass transfer by flow in porous media was established based on the lattice Boltzmann method, incorporating with the adsorption of boil-off gas on porous media surface, the diffusion in internal microcrystalline pores and the heat transfer effects. The adsorption thermodynamic property of the low-temperature boil-off gas of porous media with different porosities was analyzed. The results show that the adsorption of boil-off gas significantly raises the porous media temperature, and the porosity is negatively correlated with the adsorption rate but has little impact on the adsorption amount and adsorbent temperature; the environmental heat causes the desorption of boil-off gas from porous media, which adsorbs heat and removes about 45% of the external leaking-in heat, with the increase of the porous media porosity, the heat adsorbing effect by the desorption of boil-off gas is enhanced.

Key words: LNG, boil-off gas, porous media, adsorption, heat and mass transfer

收稿日期:2022-05-29; 修订日期:2022-07-03

基金项目:国家自然科学基金(52001207)

Fund-supported Project: National Natural Science Foundation of China(52001207)

作者简介:王健虎(1998-),男,上海交通大学硕士研究生。

通讯作者:段钟弟,男,上海交通大学助理研究员。

引 言

液化天然气(LNG)是天然气储运的主要形式之一,能够极大增加储存容量并节省成本,广泛应用于 LNG 运输船、浮式液化天然气装置和 LNG 动力船舶等。LNG 储存温度低,外界环境热量会导致 LNG 不断蒸发产生闪蒸气^[1],引发安全问题和储存损耗。为应对低温储运环境下的闪蒸气排放问题,已有研究提出了采用低温制冷机^[2]、重力热管散热^[3]及外部 BOG 再液化^[4]等多种主动控温方式来实现净零排放。天然气在多孔介质材料上的吸附容量大($>150\text{ cm}^3/\text{cm}^3$)且具有高解吸潜热($1\ 000\sim1\ 400\text{ kJ/kg}$),低温工况下气体分子动能减小使其更易被吸附在微孔结构内,吸附容量相比常温工况提升4 倍左右^[5],因此多孔材料同样具有在低温环境下对闪蒸气回收利用的潜力。如 LNG 汽化和吸附天然气(ANG)联合储存技术利用 LNG 汽化潜热对吸附储罐进行预冷,可以在较低压力下对 LNG 蒸发产生的闪蒸气进行回收储存,并且储存效率提高 25%^[6-8]。

利用 LNG 闪蒸气吸/脱附达到控温减排目的,前提是掌握 LNG 闪蒸气在低温储存环境下的吸/脱附特性及热效应。目前,国内外采用实验和数值模拟的方法开展了大量天然气吸/脱附特性和热效应的研究。Loh 等人^[9]通过实验测定了天然气在两种类型的活性炭吸附剂上的饱和吸附量数据,并利用不同等温吸附模型拟合了测量结果,计算了不同温度和浓度下的吸附热和亨利吸附定律常数。付荣等人^[10]对天然气吸附罐的热质传输过程进行模拟,并与实验数据进行对比验证,分析了在吸附过程中吸附罐不同径向位置上的温度变化特性。Rahman 等人^[11]建立了带有增强换热装置的天然气吸附储罐模型,考虑多孔介质中的热量和流动的惯性和粘性效应,分析了吸附床和增强换热装置在吸附过程中的热力学特性,研究表明,增强换热装置在不影响储罐容量下能有效抑制吸附过程中的温度上升。上述研究主要集中在常温工况下的天然气在多孔介质上的吸附能力测定和天然气吸附过程的温度变化。在低温工况下,LNG 闪蒸气的吸/脱附过程需综合考

虑低温闪蒸气的吸附等温性能、外部环境热量作用以及动态吸脱附过程的热效应等因素。因此,对于低温多因素耦合作用下 LNG 闪蒸气动态吸脱附特性,还需进一步开展研究。

针对低温闪蒸气在多孔介质孔隙尺度的对流扩散及吸附传热过程,格子玻尔兹曼方法(LBM)作为一种宏观上离散、微观上连续的介观模拟方法,因其易于并行、边界条件处理方便等特点,可适用于多孔介质流动传热传质的模拟^[12]。本文基于格子玻尔兹曼方法,建立孔隙尺度的闪蒸气流动传热传质吸附模型,研究低温闪蒸气在多孔介质材料上的吸附动力学过程及动态吸/脱附过程的热力学特性。

1 数值模型

1.1 物理过程描述及控制方程

图 1 是闪蒸气吸附传热模型的总体框架。闪蒸气在流体域内流动扩散,并传质到多孔介质表面,气体分子因分子间作用力的相互作用在多孔介质表面积聚而被吸附。多孔介质内部存在大量纳米级的微孔,多孔介质表面吸附的闪蒸气组分会沿着多孔介质内部的微孔缓慢扩散到多孔介质内部区域。闪蒸气组分在多孔介质表面的吸/脱附反应释放和吸收热量,引起流体域和多孔介质的温度改变,会影响多孔介质的饱和吸附能力,进而影响多孔介质表面的动态吸附速率。因此,对闪蒸气在多孔介质上的吸附模拟需要对流体域、多孔介质域和流固界面多区域的流动、传质、传热及吸附多过程的密度场、速度场、浓度场、温度场和吸附量多物理场进行耦合求解。

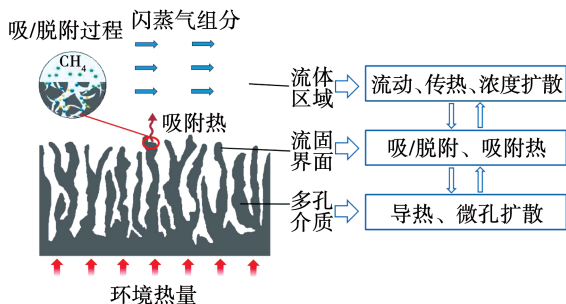


图 1 吸附模型总体框架

Fig. 1 General framework of adsorption model

闪蒸气在多孔介质上的吸附包括流体域、流固

界面及固体域的流动、传质、传热和吸附过程,其控制方程为:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C \mathbf{u}) = \nabla \cdot (D_f \nabla C) \quad (3)$$

$$(\rho c_p) \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (4)$$

式中: ρ —密度, kg/m^3 ; $\mathbf{u}$ —速度, m/s ; $\boldsymbol{\sigma}$ —粘性应力张量; C —闪蒸气浓度, mol/m^3 ; D_f —气体扩散系数, m^2/s ; T —温度, K ; c_p —比定压热容, $\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$; λ —热导率, $\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ 。

1.2 流动扩散的双分布 LB 模型

流体流动和传质控制方程中的密度场、速度场和浓度场可以通过 BGK 碰撞模型^[13]的单松弛格子玻尔兹曼方法求解:

$$f_i(\mathbf{r} + \Delta t \mathbf{e}_i, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau_v} [f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] \quad (5)$$

$$g_i(\mathbf{r} + \Delta t \mathbf{e}_i, t + \Delta t) - g_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau_d} [g_i(\mathbf{r}, t) - g_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] \quad (6)$$

式中: f_i —密度分布函数; g_i —浓度分布函数; f_i^{eq} —密度平衡分布函数; g_i^{eq} —浓度平衡分布函数; $\mathbf{r}$ —格点位置; $\mathbf{e}_i$ —离散速度; τ_v —密度松弛因子; τ_d —浓度松弛因子;下标 i —分量, D2Q9 模型中 $i = \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$, D2Q5 模型中 $i = \{0, 1, 2, 3, 4\}$ 。

平衡分布函数计算式为:

$$f_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = \rho w_i \left[1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] \quad (7)$$

$$g_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = C_i w_i \left(1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} \right) \quad (8)$$

式中: c_s —声速, D2Q9 和 D2Q5 模型中 $c_s^2 = 3$; w_i —权重因子, D2Q9 模型中 $w_0 = 4/9$, $w_{1 \sim 4} = 1/9$, $w_{5 \sim 8} = 1/36$, D2Q5 模型中 $w_0 = 1/3$, $w_{1 \sim 4} = 1/6$ 。

格子玻尔兹曼模型为满足统一的网格,格子长度为 $\Delta x = \Delta y = 1\text{lu}$ (lattice unit, 格子单位), 时间步长为 $\Delta t = 1\text{lu}$, D2Q9 和 D2Q5 模型的格子结构如图 2 所示。

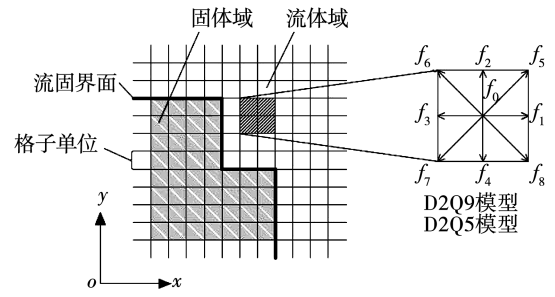


图 2 D2Q9、D2Q5 模型的格子结构

Fig. 2 Lattice structure of D2Q9 and D2Q5 models

1.3 吸附传质的动力学模型

多孔介质在微观尺度上存在微米级的孔隙以及颗粒内部大量纳米级的微孔,吸附质通过对流和扩散作用转移到多孔介质孔隙表面附近,吸附到多孔介质表面,再通过多孔介质颗粒的大量微孔向介质内部扩散^[14]。表面吸附过程用 Langmuir 吸附动力学来求解^[15]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_f \frac{\partial C}{\partial n} = k_1 C (N_m - N) - k_{-1} N \quad (9)$$

式中: N —多孔介质内闪蒸气含量, mol/m^3 ; $\mathbf{n}$ —表面法向向量; k_1 —吸附速率常数, $\text{m}^3/(\text{mol} \cdot \text{s})$; k_{-1} —脱附速率常数, s^{-1} ; N_m —饱和吸附量, mol/m^3 。

考虑闪蒸气在多孔介质中的微晶孔扩散^[16],在 LBM 模拟中多孔介质内的扩散和吸附采用均相固体扩散模型 (HDSM)。假定多孔介质颗粒是均质的,吸附质在颗粒内部通过“爬行”从一个吸附位点转移到下一个吸附位点。因此,在多孔介质内部吸附闪蒸气含量变化速率为:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_s \left(\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} \right) \quad (10)$$

式中: D_s —多孔介质内吸附闪蒸气扩散系数, m^2/s 。

1.4 流固耦合传热模型

吸附传热过程属于流固耦合传热,热量会在多孔介质内和流体域内传递,考虑多孔介质表面吸附作用产生的吸附热,采用有限差分法和显式欧拉法对传热控制方程进行求解:

$$\begin{cases} (\rho c_p)_f (\partial T / \partial t + \mathbf{u} \nabla T) = \nabla \cdot (\lambda_f \nabla T) \\ (\rho c_p)_s \partial T / \partial t = \nabla \cdot (\lambda_s \nabla T) + q_{\text{ads}} \end{cases} \quad (11)$$

$$T_{t+\Delta t} = T_t + \partial T / \partial t \cdot \Delta t \quad (12)$$

式中:下标 f、s—流体和固体;下标 $t + \Delta t$ 、 t —时刻;

q_{ads} —表面吸附作用产生的吸附热,按式(13)计算。

$$q_{\text{ads}} = Q_{\text{ads}} \cdot \partial N / \partial t \tag{13}$$

式中: Q_{ads} —等量吸附热,J/mol。

1.5 边界条件

多孔介质表面粗糙,内部存在大量微米级的孔隙结构,选择活性炭材料 Maxsorb III 作为多孔介质材料,参考 Maxsorb III 的微观图像和比表面积、平均孔径等参数绘制了尺寸为 1 cm × 1 cm 的二维吸附床模型,如图 3 所示。黑色区域为多孔介质吸附床,吸附床上部是流体区域,流体从左侧流向右侧。计算域的边界条件如表 1 所示。

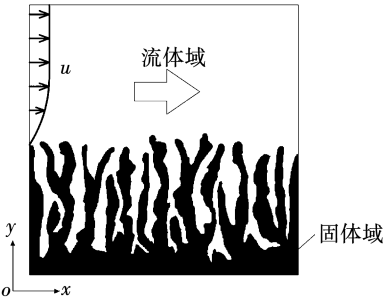


图 3 二维吸附床模型

Fig. 3 2D adsorption bed model

表 1 吸附床模型边界条件

Tab. 1 Boundary conditions of adsorption bed model

流体域左侧	流体域上侧	流体域右侧	流固界面
定速	定速	定密度	无滑移
定浓度	零通量	零通量	表面吸附

流体域上侧、左侧和右侧密度场、速度场边界条件采用 Zou-He 边界格式^[17]实现,流固界面则采用标准反弹格式实现无滑移边界条件^[18]。浓度场边界采用 Kang 边界模型^[19]以保证质量守恒:

$$\sum_i g_i e_i = Cu - D_f \nabla C \tag{14}$$

2 模型验证

2.1 LBM 扩散模型验证

为验证 LBM 吸附模型在模拟对流、扩散及吸附过程的准确性,选择具有解析解的对流扩散系统 Lévêsqe 算例进行模拟验证,图 4 为 Lévêsqe 算例的输运系统的示意图。

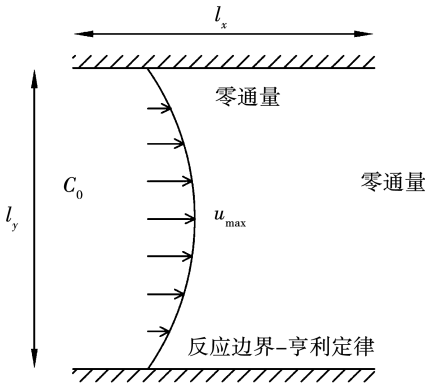


图 4 Lévêsqe 算例的输运系统示意图

Fig. 4 Transport system diagram of the Lévêsqe example

该系统的对流和扩散稳态控制方程为:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = D_f \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \tag{15}$$

管道流符合泊肃叶流动,计算域内速度呈稳态的抛物线分布,入口采用恒定浓度 C_0 ,出口及上表面采用零浓度梯度。吸附质在下表面的吸附作用满足一阶亨利吸附定律:

$$D_f \frac{\partial C}{\partial y} = KC \tag{16}$$

式中: K —亨利吸附定律常数。

Lévêsqe 算例在格子单位下的相关参数如表 2 所示。

表 2 Lévêsqe 算例相关参数

Tab. 2 Relevant parameters of the Lévêsqe example

参数	数值
管道长度 l_x	320
管道宽度 l_y	320
入口浓度 C_0	1.0
入口速度 u_{max}	0.06
吸附常数 K	1.0
气体扩散系数 D_f	1/6

Lévêsqe 算例壁面处的归一化质量通量为:

$$\bar{C}_w = \frac{l_y}{C_0} \frac{\partial C}{\partial n} = 0.854 \left(\frac{u_{\text{max}} l_y^2}{x D_f} \right)^{1/3} \tag{17}$$

式中: $\bar{C}_w$ —归一化质量通量。

LBM 方法模拟结果和解析解如图 5 所示。可以看到,LBM 模拟结果与解析解相吻合,仅在奇点 $x=0$ 处存在较大差异。结果验证了 LBM 方法在模

拟吸附过程中的扩散和吸附作用的准确性。Zhou 等人^[15-16]验证了吸附动力学模型对规则几何形态和随机几何形态的多孔介质颗粒的吸附过程模拟的准确性。有限差分的传热模型非常成熟,因此本文未对传热模型进行验证工作。

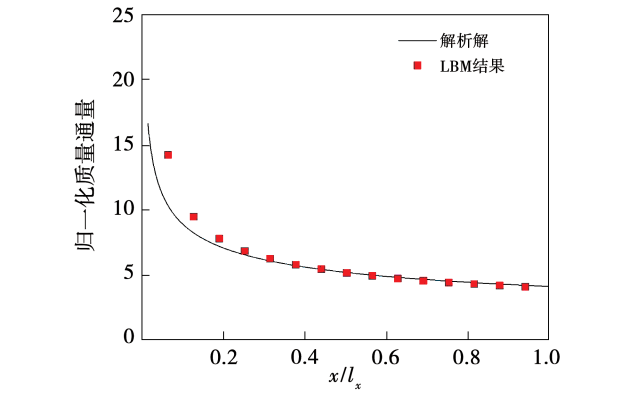


图 5 L  v  sque 算例 LBM 结果与解析解对比

Fig.5 Comparison of the results of LBM and analytical solutions for the L  v  sque example

2.2 网格收敛性验证

采用 BGK 碰撞模型对 LBM 中的碰撞算子进行近似。其中,松弛因子 τ 是控制分布函数从非平衡态向平衡态趋近速度的重要参数。根据 Chapman-Enskog 方法,松弛因子与流体运动粘度、扩散系数关系为:

$$\begin{cases} \tau_v = \nu_f/c_s^2 + 0.5 \\ \tau_d = D_f/c_s^2 + 0.5 \end{cases} \quad (18)$$

式中: τ_v —密度松弛因子; τ_d —浓度松弛因子; ν_f —流体运动粘度; D_f —气体扩散系数; c_s —声速,D2Q9 和 D2Q5 模型中 $c_s^2=3$ 。

LBM 模拟过程中的变量都是无量纲格子单位,相关物理参数需要通过无量纲相关数转换为无量纲格子单位。但 LBM 模拟对弛豫时间非常敏感,因此在对物理量进行无量纲转换时,避免松弛因子取值过小或过大,使得计算发散。本文的计算工况条件不能保证将密度松弛因子、浓度松弛因子、吸附量松弛因子和温度松弛因子均在适当范围内,因此仅在流动扩散模型使用 LBM 模拟,吸附传热部分采用有限差分法。通过验证计算,最终确定基本物理量的无量纲转换关系如表 3 所示。

表 3 物理参数和无量纲格子单位的转换

Tab.3 Conversion of physical parameters and dimensionless lattice units

物理量	物理值	格子值
计算域长度 l_x/m	0.01	500
计算域高度 l_y/m	0.01	500
时间步 $\Delta t/\text{s}$	1.00×10^{-5}	1
气体密度 $\rho_f/\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	1.826 1	1
运动粘度 $\nu_f/\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	2.55×10^{-6}	0.064
流速 $u_{\text{max}}/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	0.10	0.05
气体浓度 $C_0/\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$	114.13	10
气体扩散系数 $D_f/\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	4.58×10^{-6}	0.114 6
饱和吸附量 $N_m/\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$	—	11.413
固体扩散系数 $D_s/\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	1.32×10^{-8}	3.3×10^{-4}
吸附速率常数 $k_1/\text{m}^3 \cdot (\text{mol} \cdot \text{s})^{-1}$	2.5×10^3	0.285
脱附速率常数 k_{-1}/s^{-1}	5×10^3	0.05

闪蒸气的吸附及传热过程通过有限差分方法进行求解,其时间步长一般与 LBM 模拟的时间步长相同。为提高计算效率节约时间成本,增大传热模型的时间步长,并验证了传热计算步长的无关性,如图 6 所示。可以看到,传热计算步长在 0.000 01 ~ 0.000 05 s 内的计算结果相近,网格无关性较好。同时,当传热计算步长大于 0.000 05 s 时结果发散,因此在后续模拟中选择传热计算步长为 0.000 05 s。

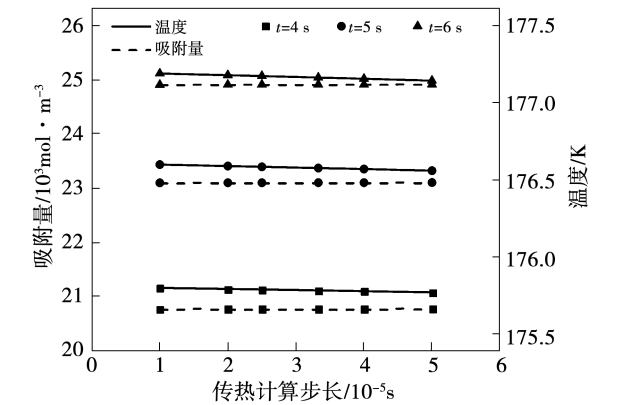


图 6 传热步长网格无关性验证

Fig.6 Grid independence verification of heat transfer steps

3 模拟结果分析

LNG 闪蒸气主要由轻烃组分组成,对于含氮量少的 LNG,闪蒸气甲烷占比 95% 以上,考虑到实际

闪蒸气在低温工况下的吸附数据有限,基于甲烷的吸附数据和物性参数开展模拟。

3.1 等温吸附量计算

多孔介质内的饱和和吸附量通过等温吸附模型来描述,包括 Langmuir 模型、Tóth 模型和 Dubinin-Astakhov 模型等^[20]。本文选取 Tóth 模型描述闪蒸气在多孔介质上的等温吸附:

$$\frac{N_m}{N_0} = \frac{k_0 \exp(Q_{\text{ads}}/RT)p}{\{1 + [k_0 \exp(Q_{\text{ads}}/RT)p]^n\}^{1/n}} \quad (19)$$

式中: N_m —饱和吸附量, mol/m³; N_0 —最大吸附量, mol/m³; p —平衡压强, MPa; k_0 —平衡常数; Q_{ads} —等量吸附热, J/mol; R —气体常数, $R = 8.314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$; n —吸附剂结构异质性参数。

根据 Maxsorb III 材料的吸附量的实验数据^[5], 使用 Tóth 模型进行拟合,如图 7 所示。得到 Tóth 模型的相关参数如表 4 所示。

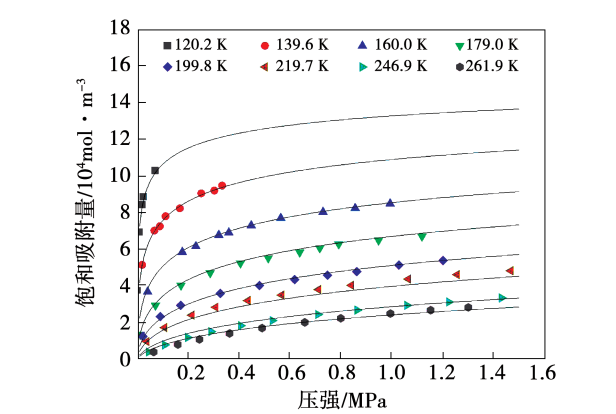


图 7 吸附等温线

Fig. 7 Adsorption isotherm of natural gas

表 4 Tóth 模型的拟合参数

参数	数值
$N_0/\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$	174 915.1
$Q_{\text{ads}}/\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$	15 078.3
k_0	0.003 6
n	0.270 5

3.2 几何域与工况参数

选取 3 种不同孔隙率的吸附床模型研究不同孔隙率对多孔介质吸附扩散传热过程的影响,如图 8

所示。流体和多孔介质 Maxsorb III 材料的传热物性参数如表 5 所示。

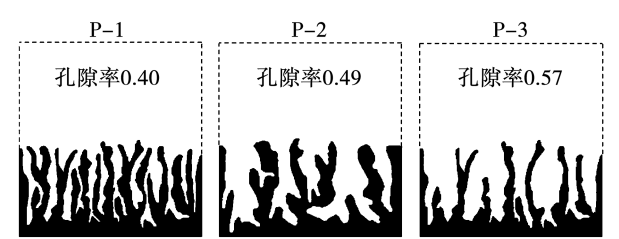


图 8 不同孔隙率的吸附床模型

Fig. 8 Adsorption bed model with different porosities

表 5 传热物性参数

参数	数值
固体密度 $\rho_s/\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	2 200
气体比热容 $c_{p,t}/\text{J} \cdot (\text{kg} \cdot \text{K})^{-1}$	2 185.5
固体比热容 $c_{p,s}/\text{J} \cdot (\text{kg} \cdot \text{K})^{-1}$	840
气体热导率 $\lambda_t/\text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$	0.012 353
固体热导率 $\lambda_s/\text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$	0.4

3.3 低温闪蒸气动态吸附特性

图 9、图 10 为 3 种孔隙率模型不同时刻的吸附量及温度分布。图 11 为 3 种孔隙率模型吸附量及温度随时间的变化情况。多孔介质内部吸附量基本沿高度分层分布。由于孔隙内部流动缓慢,因此吸附质扩散到孔隙内部缓慢,所以孔隙深处的吸附量主要由多孔介质内部微晶孔扩散作用从多孔介质外表面扩散而来。不同孔隙率的多孔介质内部吸附量变化速率基本接近,P-3 模型吸附量略高于 P-1, P-2 模型,因为 P-3 模型孔隙率最大。同时,多孔介质分枝厚度较小,通过微晶孔扩散,分支内部达到饱和吸附量的速度更快,尽管 P-2 模型孔隙率大于 P-1 模型,但其多孔介质分枝较厚,吸附质吸附到多孔介质表面后需要更长的时间扩散到内部,因此吸附量与 P-1 模型接近。

由于吸附作用放热,因此吸附过程中计算域内温度升高。流体入口温度设定为 120 K,因此整个计算域温度在吸附模拟过程中分为上下两层,上层为 120 K 的流动天然气,下层为升温的多孔介质。

计算域的温度在 $t = 200\text{ s}$ 左右达到峰值, P-1, P-2, P-3 计算域最高温度分别为 130.8, 130.5 及 131.3 K。不同孔隙率的多孔介质吸附床温度在模拟过程基本相同, 孔隙率对温度影响较小。

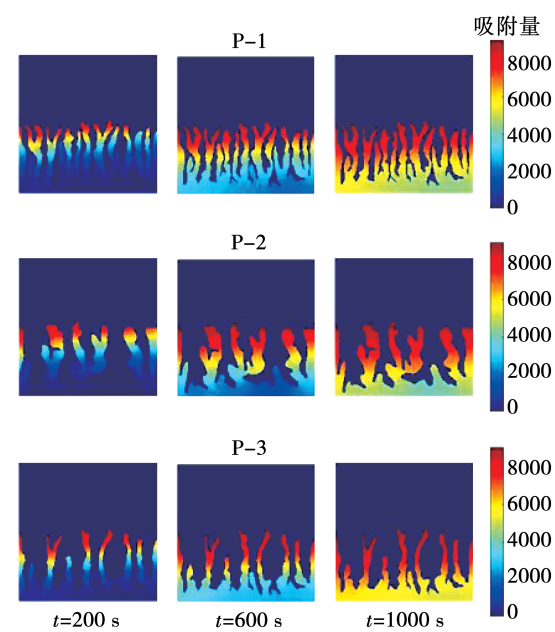


图 9 不同时刻计算域内吸附量分布 (mol/m^3)

Fig. 9 Distribution of adsorption capacity in the computational domain at different moments (mol/m^3)

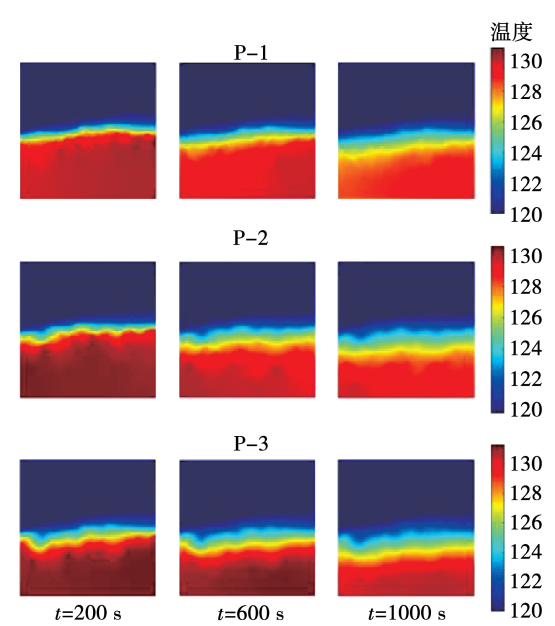


图 10 不同时刻计算域内温度分布 (K)

Fig. 10 Distribution of temperature in the computational domain at different moments (K)

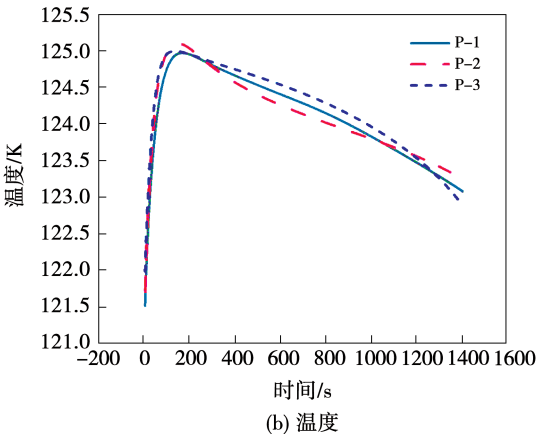
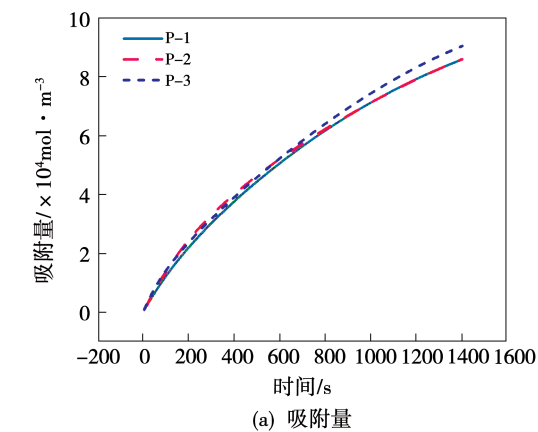


图 11 吸附量和温度随时间的变化

Fig. 11 Variation of adsorption capacity and temperature with time

图 12 为不同孔隙率吸附床模型的吸附速率随时间的变化情况。可以看到, 不同孔隙率的多孔介质吸附速率均呈下降趋势。模拟初期, 计算域内吸附质浓度较高吸附速率大, 随着吸附质浓度降低吸附速率下降。因为计算域上层吸附质流动带走热量及吸附速率下降产热降低, 所以计算域内温度在 $t = 200\text{ s}$ 后逐渐降低。

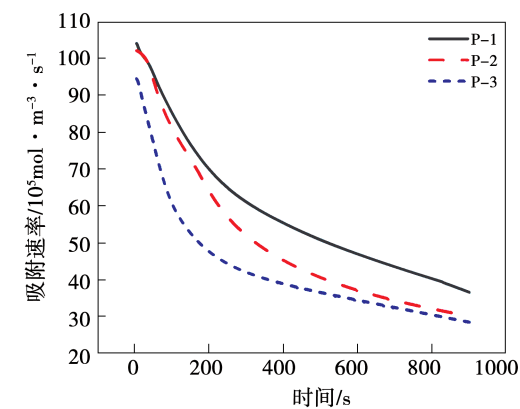


图 12 吸附速率随时间的变化

Fig. 12 Variation of adsorption rate with time

同时, P-3 的吸附速率始终最小,P-1 的吸附速率最大,即吸附速率与多孔介质孔隙率呈负相关。3 种不同孔隙率的工况,多孔介质表面积与孔隙率呈负相关,而吸附作用是一种表面反应,其表面积越大吸附速度也越大,因此吸附速度与孔隙率呈负相关关系。

3.4 低温闪蒸气动态脱附特性

在研究低温闪蒸气动态脱附热力学特性时,初始条件设定为多孔介质达到饱和吸附状态,吸附床底部施加恒定热流,模拟低温工况下的环境热量作用。考虑到多孔介质吸附床的比热容、热导率和吸附质均有较大差距,因此选取 3 种不同孔隙率吸附床进行模拟,并与无吸附床和含吸附床但不考虑吸附作用的工况对比,脱附工况如表 6 所示。不同时刻计算域内温度分布如图 13 所示。

表 6 脱附工况信息

Tab. 6 Desorption condition information

工况	吸附床	吸附作用
S-1	无	不考虑
S-2	P-1	不考虑
S-3	P-1	考虑
S-4	P-2	考虑
S-5	P-3	考虑

S-1 工况计算域内的吸附质密度仅为 1.86 kg/m^3 ,比热容为 $2185.5\text{ J/(kg}\cdot\text{K)}$,因此在底部热源加热下温度急剧升高;而 S-2 工况计算域内的多孔介质密度达到 $2\ 200\text{ kg/m}^3$,比热容为 $840\text{ J/(kg}\cdot\text{K)}$,因此温度较 S-1 工况升高很小, $t=400\text{ s}$ 时计算域最高温度为 144.37 K 。同时,多孔介质的热导率远大于天然气,因此 S-2 工况温度在竖直方向的梯度小于 S-1 工况。S-3, S-4, S-5 工况由于脱附吸热效果,温度升高都很小, $t=800\text{ s}$ 时最高温度分别为 $129.54, 130.08$ 和 130.35 K ,且高温区域都位于多孔介质孔隙底部到计算域下边界之间,脱附吸热作用使得极少的热量从计算域底部扩散到计算域上层流体区域。

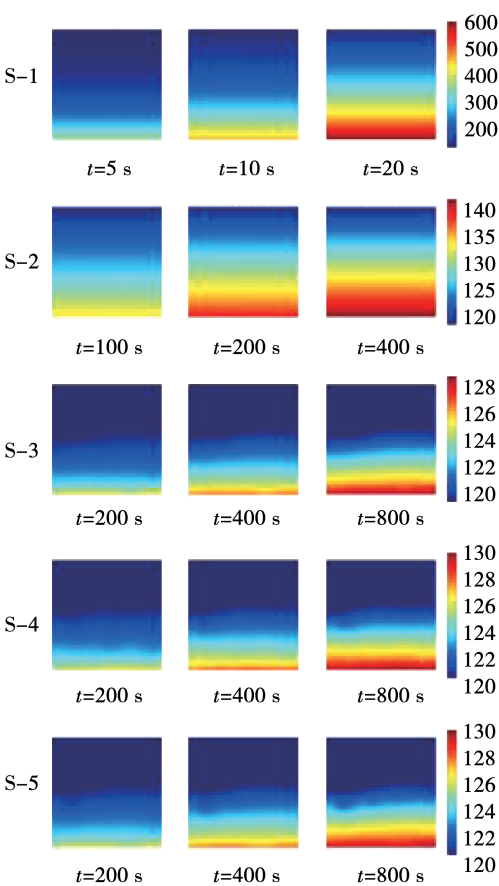


图 13 不同时刻计算域内温度分布 (K)

Fig. 13 Distribution of temperature in the computational domain at different moments (K)

图 14 为温度随时间变化情况。仅在初始阶段 S-3, S-4, S-5 工况温度升高速率接近 S-2 工况,随着底部恒定热源的热量传递到多孔介质孔隙底部,开始发生脱附反应后 S-3, S-4, S-5 工况温度升高速率急剧下降到远小于 S-2 工况的水平。因此,天然气在多孔介质表面的脱附作用可以吸收大部分外界输入热量以控制温度升高。对比不同孔隙率的多孔介质吸附床的脱附吸热作用, S-3 工况的孔隙率为 0.40,其温度升高最小, $t=800\text{ s}$ 时计算域温度升高为 2.40 K , S-4, S-5 工况的孔隙率分别为 0.49, 0.57,两个工况的温度升高基本相同,分别为 $2.64, 2.63\text{ K}$ 。

考虑到多孔介质和流体的比热容等热力学参数相差较大,计算域的平均温升无法直观显示脱附作用吸收的热量,因此进一步分析了模拟过程中多孔介质内吸附质吸附量变化及计算域内热量增长情况。图 15 为 S-3, S-4, S-5 工况的吸附量及计算域热量增长随时间的变化曲线。 $t=0\sim10\text{ s}$ 内,计

算域的热量增长基本等于底部恒定热流的热量输入,多孔介质内的吸附质吸附量变化也很小, $t = 10\text{ s}$ 后热量传递到多孔介质表面,脱附反应速率上升,多孔介质内的吸附质吸附量迅速减少,同时脱附吸收热量使得计算域内的热量增长速率放缓,远小于底部恒定热流的热量输入速率。孔隙率对计算域的热量增长具有一定影响:S-3 工况的热量增长最多,S-4 工况的热量增长次之,S-5 工况的热量增长最少, $t = 800\text{ s}$ 时 S-3,S-4,S-5 工况的热量增长分别为 $0.006\ 37,0.006\ 02$ 和 $0.005\ 56\text{ J}$,相应的 S-3 工况的吸附量降低最少,S-5 的吸附量降低最多,S-3,S-4,S-5 工况吸附量分别降低 $8\ 206,9\ 069$ 和 $10\ 315\text{ mol/m}^3$,较初始吸附量分别减少了 $7.83\%,8.65\%,9.84\%$ 。根据模拟结果,热量首先传递到多孔介质孔隙底部区域,脱附作用主要发生在该区域。不同孔隙率的吸附床模型中,S-5 工况的吸附床孔隙底部表面积大于 S-4 大于 S-3,因此 S-5 工况的脱附速率最大、热量增长最少。

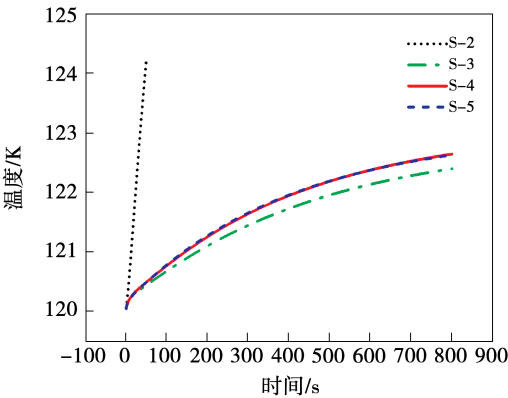


图 14 温度随时间的变化情况

Fig. 14 Variation of temperature with time

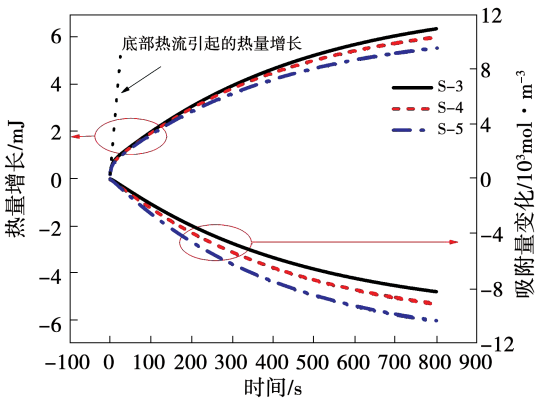


图 15 吸附量变化和热量增长曲线

Fig. 15 Adsorption capacity change and heat growth curves

计算域底部恒定热流引起的计算域内热量输入速率为 $0.000\ 2\text{ J/s}$,而 S-3,S-4,S-5 工况的平均脱附速率约为 $8 \times 10^5\text{ mol/m}^3 \cdot \text{s}$,热量吸收速率约为 $9.5 \times 10^{-5}\text{ J/s}$ 。因此,天然气在多孔介质表面的脱附作用可以将 45% 以上的外界输入热量吸收,能有效控制外界环境热量输入引起的温度升高。

4 结 论

基于格子玻尔兹曼方法,采用 Langmuir 吸附动力学模型,考虑微晶孔扩散反应,模拟了闪蒸气在 120 K 低温工况的吸附传热传质过程,分析了吸附、脱附和不同孔隙率的传热传质影响,得出结论:

- (1) 低温闪蒸气在多孔介质上的吸附速率与多孔介质孔隙率呈负相关,但差距较小。
- (2) 闪蒸气在多孔介质上的吸附作用释放热量,引起多孔介质及流体区域的温度上升,孔隙率对温度变化的影响较小。
- (3) 闪蒸气在多孔介质上的脱附反应吸收热量,热量吸收效率与孔隙率呈正相关,脱附吸热作用能有效控制外界热源输入引起的温度升高。

参考文献:

[1] LEE J H,KIM Y J,HWANG S. Computational study of LNG evaporation and heat diffusion through a LNG cargo tank membrane [J]. Ocean Engineering,2015,106:77-86.

[2] HASTINGS L J,BRYANT C B,FLACHBART R H,et al. Large-scale demonstration of liquid hydrogen storage with zero boiloff [J]. AIP Conference Proceedings,2002,613(1):1276-1283.

[3] PLACHTA D. Results of an advanced development zero boil-off cryogenic propellant storage test [M]. United States: American Institute of Aeronautics and Astronautics,2004.

[4] HO S H,RAHMAN M M. Nozzle injection displacement mixing in a zero boil-off hydrogen storage tank [J]. International Journal of Hydrogen Energy,2008,33(2):878-888.

[5] RAHMAN K A. Experimental and theoretical studies on adsorbed natural gas storage system using activated carbons [D]. Singapore: National University of Singapore,2011.

[6] ROSZAK E A,CHOROWSKI M. Exergy analysis of combined simultaneous liquid natural gas vaporization and adsorbed natural gas cooling [J]. Fuel,2013,111:755-762.

[7] KAYAL S,SUN B,CHAKRABORTY A. Study of metal-organic framework MIL-101 (Cr) for natural gas (methane) storage and compare with other MOFs (metal-organic frameworks) [J]. Energy,2015,91:772-781.

[8] CHUGAEV S S,FOMKIN A A,MEN'SHCHIKOV I E,et al. Ad-

sorption accumulation of liquefied natural gas vapors[J]. Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces,2020,56(5): 897-903.

[9] LOH W S,RAHMAN K A,CHAKRABORTY A,et al. Improved isotherm data for adsorption of methane on activated carbons[J]. Journal of Chemical and Engineering Data, 2010, 55 (8): 2840-2847.

[10] 付 荣,常 琳,王安鹏. 天然气吸附罐吸附过程温度场的数学模拟及实验研究[J]. 石油与天然气化工,2016,45(4): 42-46.

FU Rong,CHANG Lin,WANG An-peng. Mathematical simulation and experimental research on temperature field of adsorption process in natural gas storage tank[J]. Chemical Engineering of Oil and Gas,2016,45(4):42-46.

[11] RAHMAN K A,LOH W S,CHAKRABORTY A,et al. Thermal enhancement of charge and discharge cycles for adsorbed natural gas storage[J]. Applied Thermal Engineering,2011,31(10): 1630-1639.

[12] 王灵权. 格子 Boltzmann 方法在多孔介质流中的多尺度应用研究[D]. 重庆:重庆大学,2017.

WANG Ling-quan. A research on the lattice Boltzmann method for its application in multi-scale porous flows [D]. Chongqing: Chongqing University,2017.

[13] GUO Zhao-li,SHU Chang. Lattice Boltzmann method and its applications in engineering[M]. New Jersey:World Scientific,2013.

[14] WANG H,BAI J Q,QU Z G,et al. Numerical study of heat transfer in process of gas adsorption in a Cu-benzene-1,3,5-tricarboxylic acid particle adsorption bed[J]. International Journal of Hydrogen Energy,2019,44(23):11989-12002.

[15] ZHOU L,QU Z G,CHEN L,et al. Lattice Boltzmann simulation of gas-solid adsorption processes at pore scale level[J]. Journal of Computational Physics,2015,300:800-813.

[16] ZHOU L,QU Z G,DING T,et al. Lattice Boltzmann simulation of the gas-solid adsorption process in reconstructed random porous media[J]. Physical Review E,2016,93(4):043101.

[17] ZOU Q,HE X. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model[J]. Physics of Fluids,1997,9(6):1591-1598.

[18] 胡 洋. 基于 LBM 的复杂边界和多孔介质流动和传热问题的数值方法研究[D]. 北京:北京交通大学,2017.

HU Yang. Numerical methods of flow and heat transfer in complex geometries and porous media based on lattice Boltzmann method [D]. Beijing:Beijing Jiaotong University,2017.

[19] KANG Q,LICHTNER P C,ZHANG D. An improved lattice Boltzmann model for multicomponent reactive transport in porous media at the pore scale[J]. Water Resources Research,2007,43(12):W12S14.1-W12S14.12.

[20] DO D D. Adsorption analysis: equilibria and kinetics[M]. New Jersey:World Scientific,1998.

(丛 敏 编辑)

(上接第 89 页)

[7] 郑莆燕,柴国旭,任建兴. 供热改造机组运行性能研究[J]. 华东电力,2013,41(6):1393-1395.

ZHENG Pu-yan,CHAI Guo-xu,REN Jian-xing. Operating performance of cogeneration retrofits unit[J]. East China Electric Power, 2013,41(6):1393-1395.

[8] 张龙英,张学镭,原树峰,等. 300 MW 供热机组调峰性能及其影响因素研究[J]. 汽轮机技术,2016,58(5):391-395.

ZHANG Long-ying,ZHANG Xue-lei,YUAN Shu-feng,et al. Investigation of peak regulation capability and influence factors in a 300 MW cogeneration power plant[J]. Turbine Technology,2016,58(5):391-395.

[9] 郭 建,周建新,于海泉,等. 双抽可调供热机组供热热源优化研究[J]. 热能动力工程,2020,35(10):10-17.

GOU Jian,ZHOU Jian-xin,YU Hai-quan,et al. Study on the optimization of heating steam sources for double extraction adjustable heating unit[J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and Power,2020,35(10):10-17.

[10] 宫卫平,管洪军,李宏伟,等. 基于 EBSILON 仿真软件的联机供热负荷分配优化[J]. 山东大学学报(工学版),2021,51(4):77-83.

GONG Wei-ping,GUAN Hong-jun,LI Hong-wei,et al. Optimization of heating load distribution of combined unit based on EBSI-

LON simulation software[J]. Journal of Shandong University(Engineering Science),2021,51(4):77-83.

[11] 吴 涛,赖 菲,刘 震,等. 热电联产机组在深度调峰模式下的负荷智能分配[J]. 热力发电,2021,50(9):119-127.

WU Tao,LAI Fei,LIU Zhen,et al. Intelligent load distribution of cogeneration units in deep peak regulation mode[J]. Thermal Power Generation,2021,50(9):119-127.

[12] 温志刚,王 勇,骆贵兵,等. 模拟退火算法在供热机组负荷分配中的应用研究[J]. 热力发电,2003,32(7):18-20.

WEN Zhi-gang,WANG Yong,LUO Gui-bing,et al. Research on load distribution of simulated annealing algorithm in heating unit[J]. Thermal Power Generation,2003,32(7):18-20.

[13] 王培红,李 琳,董益华,等. 供热机组热电负荷优化算法研究[J]. 汽轮机技术,2004,46(1):37-39.

WANG Pei-hong,LI Lin,DONG Yi-hua,et al. Research on thermal power load optimization algorithm for heating unit[J]. Turbine Technology,2004,46(1):37-39.

[14] 王 珊,刘 明,严俊杰. 采用粒子群算法的热电厂热电负荷分配优化[J]. 西安交通大学学报,2019,53(9):159-166.

WANG Shan,LIU Ming,YAN Jun-jie. Optimizing heat-power load distribution of thermal power plants based on particle swarm algorithm[J]. Journal of Xi'an Jiaotong University,2019,53(9):159-166.

(丛 敏 编辑)