

络合铁法脱硫工艺在FLNG脱硫反应器中的数值模拟

张博文, 曹光, 唐晓

中国石油大学(华东), 机电工程学院, 青岛, 山东, 266555

引言: 络合铁法脱硫工艺适用于浮式条件下天然气脱硫装置中, 由于海洋恶劣环境的影响, 对脱硫工艺和装置都提出严格要求, 将脱硫工艺应用于自主研发的脱硫反应器中并对装置进行优化是十分必要的。利用 COMSOL Multiphysics® 多物理场仿真软件的化学反应工程模块和反应流接口对络合铁法脱硫工艺在自主研发的反应器中进行模拟, 得到各物质浓度随时间分布及反应流速的模拟结果, 进而优化装置。



图 1. 自主研发反应器

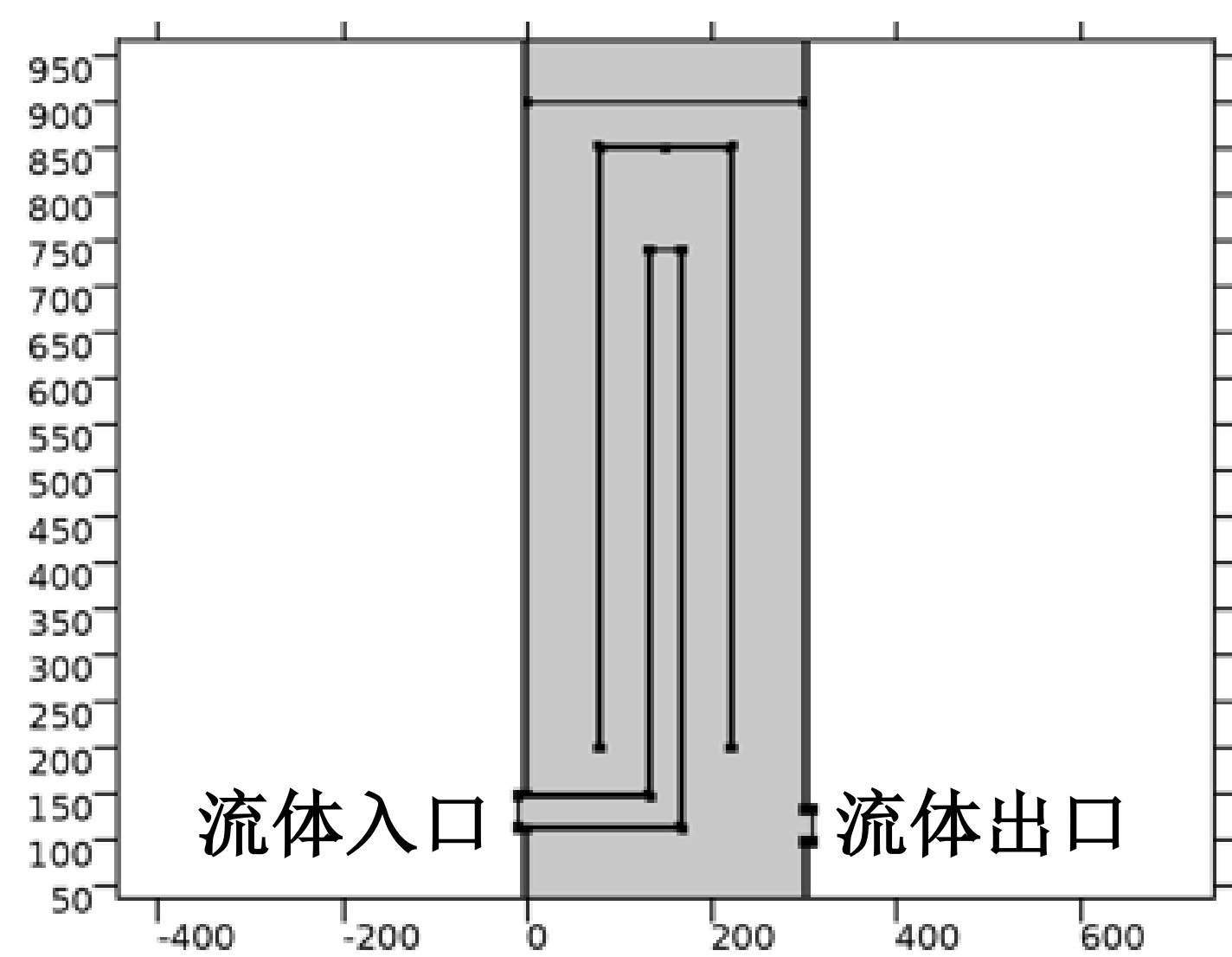
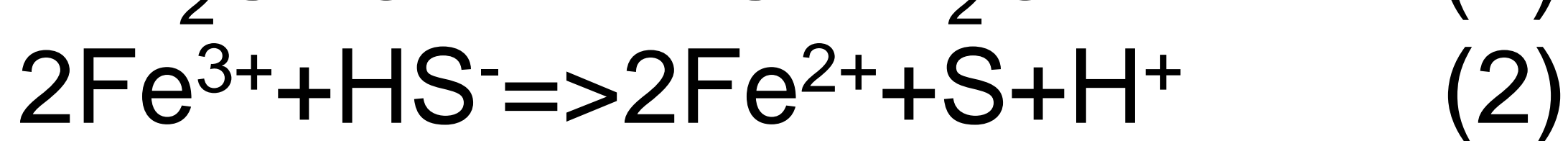
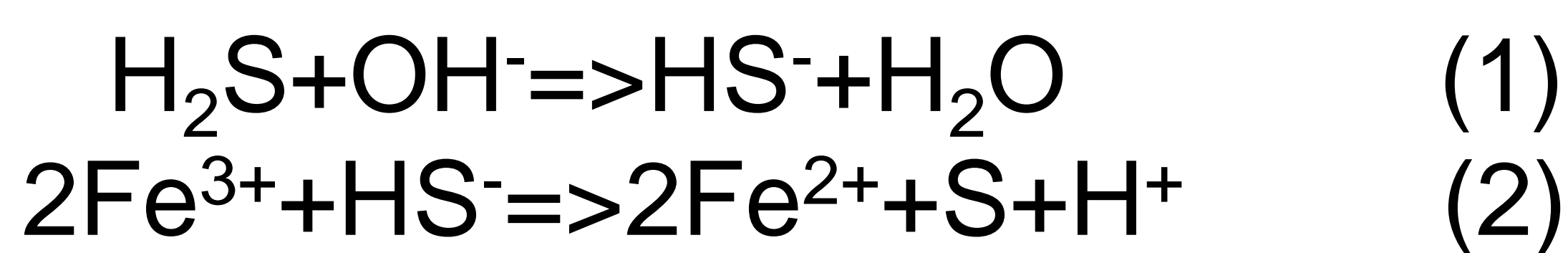


图 2. 反应器二维几何模型

计算方法: 使用化学反应工程模块中的反应工程、稀物质传递和反应流接口对络合铁法脱硫工艺中主要反应物及产物浓度分布随时间变化及反应流速度随时间变化进行模拟, 从而进一步优化反应器结构。

反应工程:



稀物质传递:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_i \nabla c_i) + \mathbf{u} \cdot \nabla c_i = R_i$$

$$\mathbf{N}_i = -D_i \nabla c_i + \mathbf{u} c_i$$

湍流:

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

$$\nabla \cdot \left[-p \mathbf{I} + (\mu + \mu_T) (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \right] + \mathbf{F}$$

$$\rho \nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0$$

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) k = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \epsilon$$

$$\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \epsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k}$$

结果: 通过计算得到了反应器中三价铁离子、二价铁离子及单质硫的浓度及分布情况

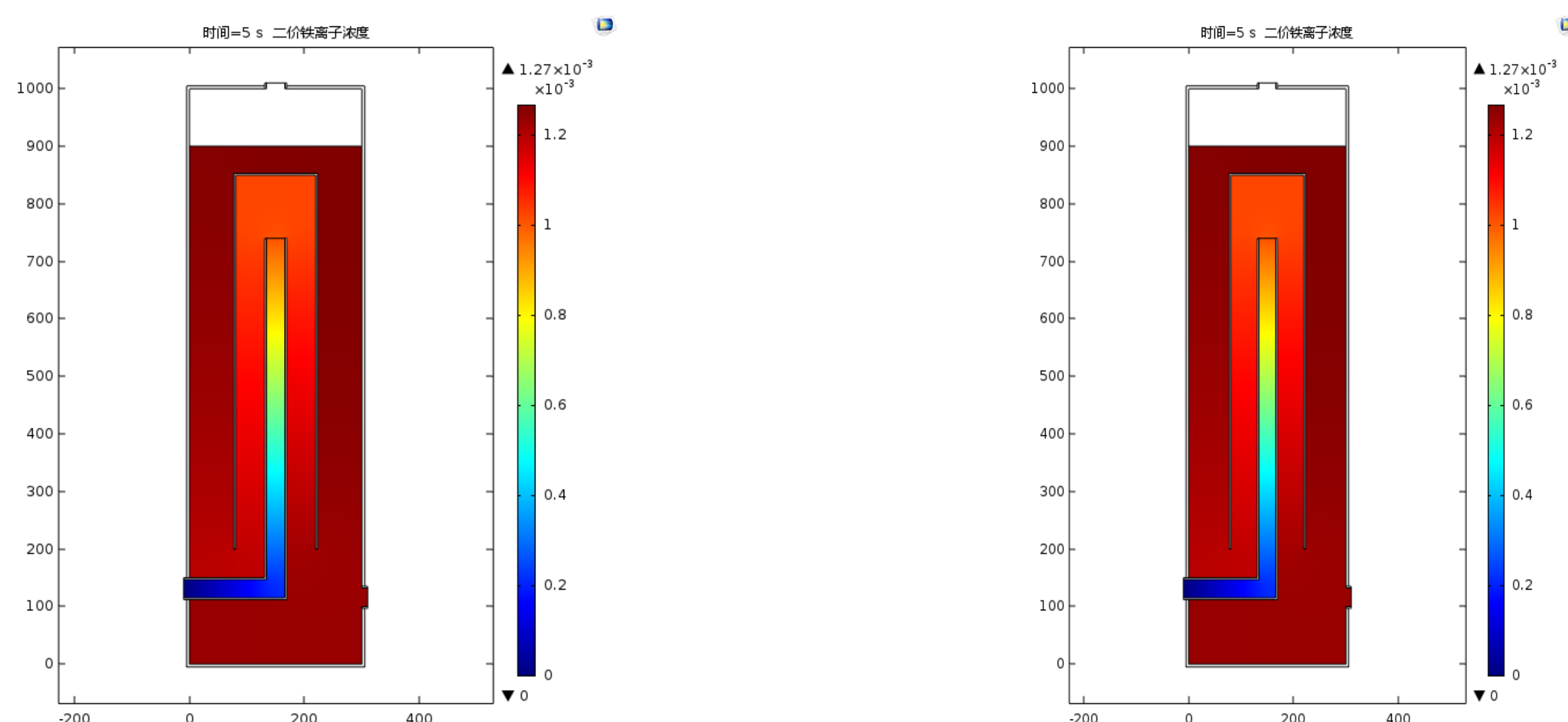


图 3. a 5s 时 $c(\text{Fe}^{2+})$ 分布 图 3. b 10s 时 $c(\text{Fe}^{2+})$ 分布

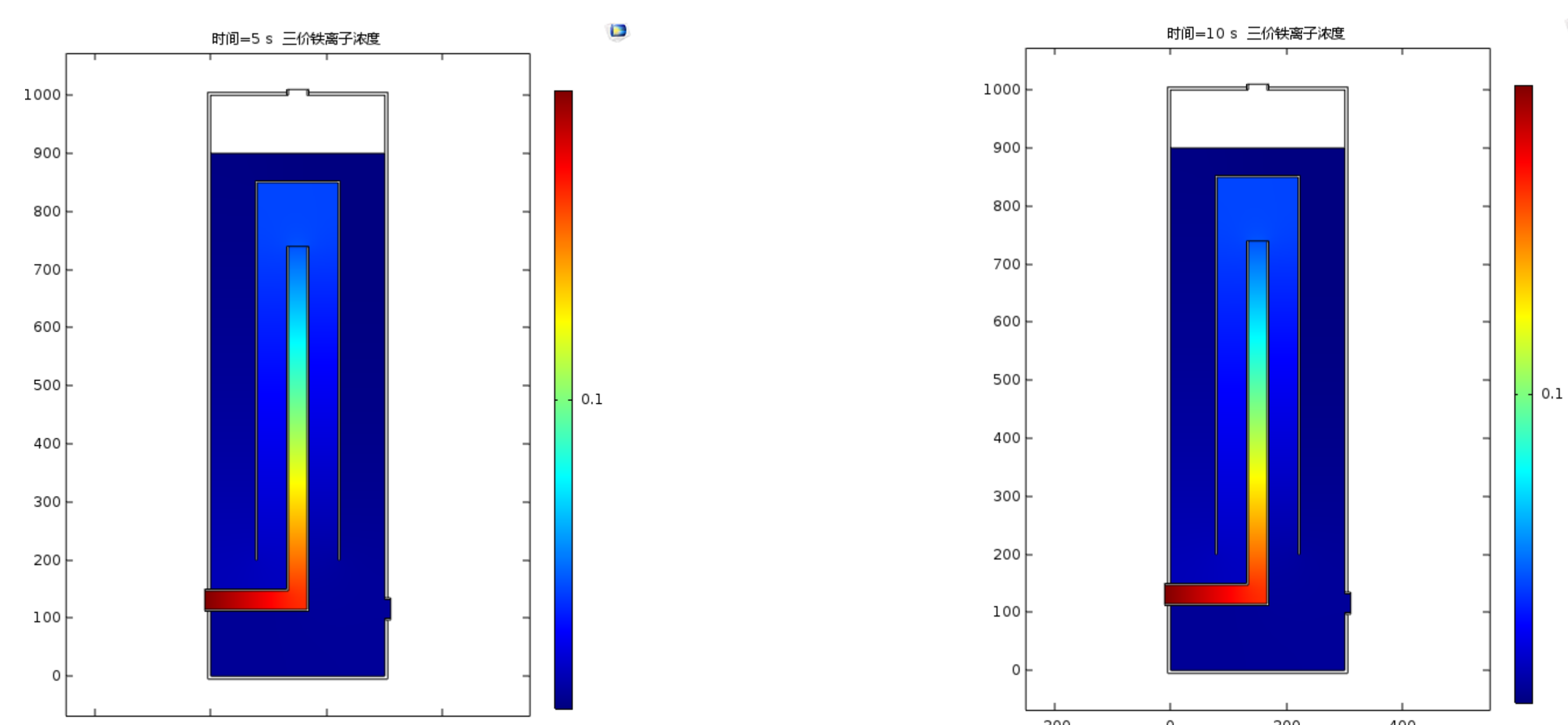


图 4. a 5s 时 $c(\text{Fe}^{3+})$ 分布 图 4. b 10s 时 $c(\text{Fe}^{3+})$ 分布

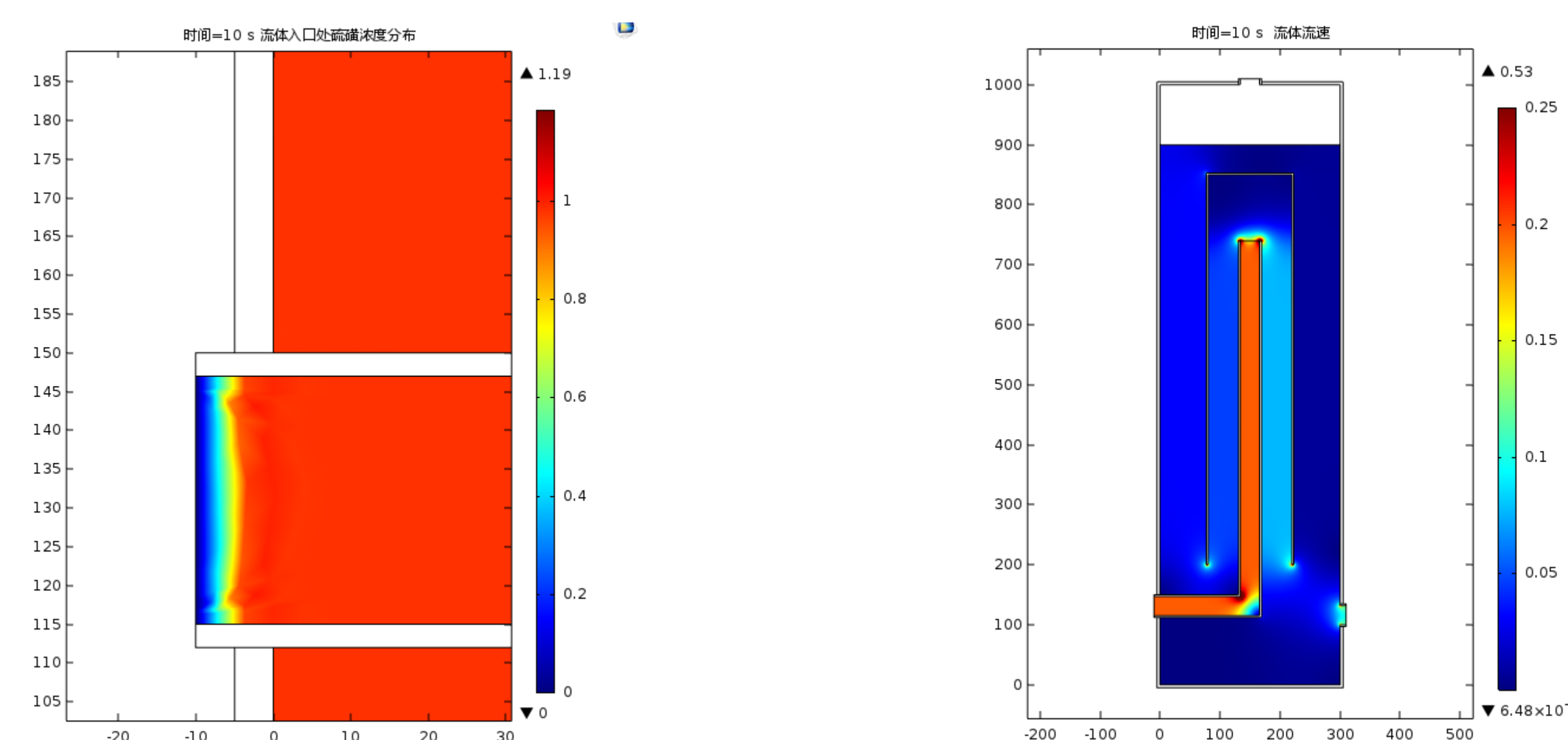


图 5. a 流体入口处硫磺浓度分布

图 5. b 10s 时流体速度分布

结论: 计算说明, 络合铁法脱硫工艺中脱硫反应迅速, 在设计的多重套管内反应即可完成同时生成均匀分布的硫磺单质, 且可以精确观察反应物及生成物浓度随时间变化。下一步将引入晃动条件和催化剂再生装置形成整个络合铁工艺流程, 进一步研究工艺和装置的优化。

参考文献:

1. 罗立文, 等. Fe-EDTA系统脱硫方法研究, 石油大学学报. 1996, 20(5):73-76
2. 杨建平, 等. 络合铁法脱除酸气中硫化物的试验研究. 化学工业与工程技术, 2002, 23(2):23-24
3. H J, Antonie A C. Kinetics of H₂S absorption into aqueous ferric solutions of EDTA and HEDTA. AIChE J, 1994, 40(3):433-443