

УДК 532.529: 517.4

Б.Б.Рохман<sup>1</sup>, докт.техн.наук (Институт угольных энерготехнологий НАН Украины, Киев), В.Г.Выфатнюк<sup>2</sup>, Д.В.Выфатнюк<sup>3</sup> (СПКТЬ "Энергомашпроект", Киев), А.С.Квасневский<sup>4</sup> (Институт газа НАН Украины, Киев)

## Моделирование тепломассообмена и химического реагирования газодисперсного потока пылевидных частиц угля в высокотемпературном газификаторе

Построена модель восходящего движения, тепломассообмена и химического реагирования полидисперсного ансамбля частиц с учетом лучистого и конвективного теплообмена между газом, частицами и шлаком, гетерогенных и гомогенных реакций, межфазного взаимодействия. Особенностью этой модели является представление летучих формулой кислородосодержащего соединения  $\text{CH}_{2,404}\text{O}_{0,522}$ , которое при высокоскоростном нагреве распадается на компоненты  $\text{CO}$ ,  $\text{C}_7\text{H}_8$  и  $\text{H}_2$ , после чего  $\text{C}_7\text{H}_8$  и  $\text{H}_2$  взаимодействуют между собой, образуя  $\text{C}_6\text{H}_6$  и  $\text{CH}_4$ . Найдены оптимальные значения  $B_{\text{O}_2}/B_{\text{BV}} = 0,785$  и  $B_{\text{H}_2\text{O}}/B_{\text{BV}} = 0,052$ , обеспечивающие состав синтетического газа с высоким содержанием горючих – 93,2%, низкой концентрацией балласта – 2,8%, степенью конверсии углерода 99,9% и калорийностью 11,17 МДж/м<sup>3</sup>. Библ. 16, рис. 6.

**Ключевые слова:** парокислородная газификация, реактор, уголь, пиролиз, модель, синтетический газ, частица.

ORCID: <sup>1</sup>0000-0002-1270-6102; <sup>2</sup>0000-0003-0771-2652; <sup>3</sup>0000-0002-7823-2560; <sup>4</sup>0000-0002-2213-6481

### Обозначения

A, N, O, S, V, W	массовые доли золы, азота, кислорода, серы, летучих веществ и влаги в твердом топливе	$Q$	тепловой эффект реакции (кДж/кмоль) или тепловой поток (кДж/(с·м <sup>3</sup> ))
$B$	расход, кг/ч	$R$	объемная доля компонента газовой смеси
$C$	концентрации газовых компонентов (кмоль/м <sup>3</sup> ) или массовая доля углерода в твердом топливе	Re	критерий Рейнольдса
$c$	теплоемкость, кДж/(кг·К)	$R_g$	универсальная газовая постоянная, кДж/(кмоль·К)
$C_d$	коэффициент аэродинамического сопротивления частицы	$t$	температура, °С
$D$	коэффициент диффузии, м <sup>2</sup> /с	$T$	температура, К
$E$	энергия активации, кДж/кмоль	$u$	скорость, м/с
$F$	сила, Н/м <sup>3</sup>	$z$	аксиальная координата, м
$f$	сечение, м <sup>2</sup>	$\alpha$	коэффициент массообмена, м/с
$H$	высота (м) или массовая доля водорода	$\alpha_1, \alpha_2$	коэффициенты выхода летучих
$h$	коэффициент конвективного теплообмена, кДж/(с·м <sup>2</sup> ·К)	$\beta$	истинная объемная концентрация частиц
$g$	ускорение свободного падения, м/с <sup>2</sup>	$\delta$	диаметр частицы, м
$k$	константа скорости реакции, м/с	$\eta$	постоянная спада экспоненты, 1/м
$k_{01}, k_{02}$	константы скоростей выхода летучих, с <sup>-1</sup>	$\mu$	молекулярная масса, кг/кмоль
$K_{eq}$	константа равновесия	$\xi$	предэкспоненциальный множитель, м/с
Nu	критерий Нуссельта	$\rho$	плотность, кг/м <sup>3</sup>
$P$	давление, Н/м <sup>2</sup>	$\varphi$	степень конверсии углерода
Pr	критерий Прандтля	$M$	количество фракций

**Индексы нижние:**  $a$  – сила аэродинамического сопротивления частицы; ash – зола; C – углерод;  $C_\phi$  – фиксированный углерод;  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{C}_6\text{H}_6$ ,  $\text{CH}_{2,404}\text{O}_{0,522}$ ,  $\text{C}_7\text{H}_8$  – окись и двуокись углерода, метан, водяной пар, водород, азот, бензол, кислородосодержащее соединение, толуол;  $\text{C} + \text{O}_2$ ,  $\text{C} + 0,5\text{O}_2$ ,  $\text{C} + \text{CO}_2$ ,  $\text{C} + \text{H}_2$ ,  $\text{C} + \text{H}_2\text{O}$  – гетерогенные реакции;  $\text{CO} + \text{O}_2$ ,  $\text{CH}_4 + \text{O}_2$ ,  $\text{H}_2 + \text{O}_2$ ,  $\text{C}_7\text{H}_8 + \text{O}_2$ ,  $\text{CH}_{2,404}\text{O}_{0,522} + \text{O}_2$ ,  $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{C}_6\text{H}_6 + \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{C}_6\text{H}_6 + \text{O}_2$  – гомогенные реакции; conv – конвективный теплообмен;  $\text{CO}_2 \rightarrow \text{cm}$ ,  $\text{O}_2 \rightarrow \text{cm}$ ,  $\text{CO} \rightarrow \text{cm}$ ,  $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{cm}$  – диффузия углекислого газа, кислорода, окиси

углерода и водяного пара в газовую смесь;  $D$  – диффузия;  $eq$  – константа равновесия;  $fuel$  – исходный уголь;  $g$  – газ;  $gog$  – горючая масса;  $g \rightarrow slag$ ,  $j \rightarrow slag$ ,  $s \rightarrow slag$ ,  $j \rightarrow g$ ,  $s \rightarrow g$  – лучистый теплообмен между газом и шлаковой пленкой, частицами кокса фракции  $j$  и шлаковой пленкой, золы фракции  $s$  и шлаковой пленкой, кокса фракции  $j$  и газом, золы фракции  $s$  и газом;  $i = j$ ,  $s, j = 1 - M_C$ ;  $s = 1 - M_{ash}$ ;  $O_2$  – кислород;  $p$  – частица;  $P$  – давление;  $rad$  – лучистый теплообмен;  $gerad$  – переизлучение;  $r$  – реактор;  $slag$  – шлак;  $БУ$  – бурый уголь;  $лет$  – летучие;  $\phi$  – фиксированный;  $\Sigma$  – сумма;  $0$  – начальные условия.

**Индексы верхние:**  $w$  – поверхность;  $r$  – рабочая масса.

**Введение.** В последние годы одной из приоритетных задач украинской экономики является сокращение потребления природного газа, объем импорта которого из России и ЕС в 2015 году составил 16,4 млрд  $m^3$  по цене  $\sim 340$  \$ за 1000  $m^3$  газа. Такая высокая цена делает нерентабельными металлургическую промышленность и производство различных химических продуктов на основе импортируемого газа, например, аммиака (основного сырья для получения азотных удобрений), метанола, уксусной кислоты и т.д. Для сокращения объемов поставок газа из-за рубежа необходимо наращивать собственную добычу и широко внедрять газозамещающие технологии, такие, например, как использование угольной пыли или бинарной смеси (уголь и биоэнергетические ресурсы) в доменных печах и энергетических установках, а также производство синтетического газа из угля. Отметим, что в мире почти четверть аммиака и более трети метанола производится путем газификации твердого топлива.

Самым распространенным сырьем для газификации является уголь, из него производится 69,23% синтетического газа в мире, 13,43% – из нефти, 13,36% – из природного газа, 2,71% – из нефтекокса, 0,68% – из биомассы, 0,48% – из отходов и 0,12% – из другого сырья. В процессе газификации преимущественно используют молодые угли, такие как бурые и каменные. В настоящее время добыча каменных углей в Украине существенно сократилась. В этих условиях актуальным становится применение бурых углей Александровского месторождения или бинарных твердотопливных смесей (бурые и каменные угли, биоэнергетические ресурсы и бурые (или каменные) угли) в качестве основного сырья для производства генераторного газа.

В настоящее время на мировом рынке широкое распространение получили три технологии газификации твердых топлив: а) поточные: Shell, Prenflo(Uhde), Siemens(GSP), GE Energy(Texaco);

б) с кипящим слоем: HTW(Uhde), U-Gas(GTI), TRIG(KBR); в) с неподвижным слоем: Lurgi (SE-DIN), BGL. Следует подчеркнуть, что парокислородная газификация углей в потоке имеет ряд существенных преимуществ перед технологиями кипящего и неподвижного слоев: а) содержание горючей части  $CO+H_2$  – до 95%; б) степень конверсии углерода – 97-99%; в) содержание балласта ( $CO_2, H_2O$ ) – 3-5%.

Настоящая статья посвящена моделированию и теоретическому исследованию одноступенчатой схемы парокислородной газификации полидисперсного ансамбля частиц бурого угля в высокотемпературном потоке под давлением. При такой организации процесса сухая мелкодисперсная угольная пыль 1, пар и кислород 2 подаются в нижнюю зону реактора, где происходит прогрев газозвеси, выход и горение летучих с последующей конверсией углеродного остатка в восстановительной зоне. Полученный таким образом генераторный газ поступает в очистительную систему через верхнюю горловину реактора 6, а жидкий шлак 5 сливается через нижнюю воронку 4 в шлаковую ванну, где кристаллизуется и удаляется из реактора при помощи системы шлюзовых бункеров (рис. 1).

Для конструирования подобных устройств необходимо: а) построить модель, описывающую восходящее движение, тепломассообмен и химическое реагирование полидисперсного ансамбля частиц угля в реакторе с учетом лучистого и конвективного теплообмена между газом и частицами, газодисперсным потоком и шлаковой пленкой, межфракционного переизлучения, гетерогенных и гомогенных реакций, сил тяжести и межфазного взаимодействия; б) при помощи этой модели получить детальную информацию о рабочем процессе парокислородной газификации, которая может быть использована для разработки конструкции реактора под давлением 4,2 МПа на стадии эскизно-технического проектирования.

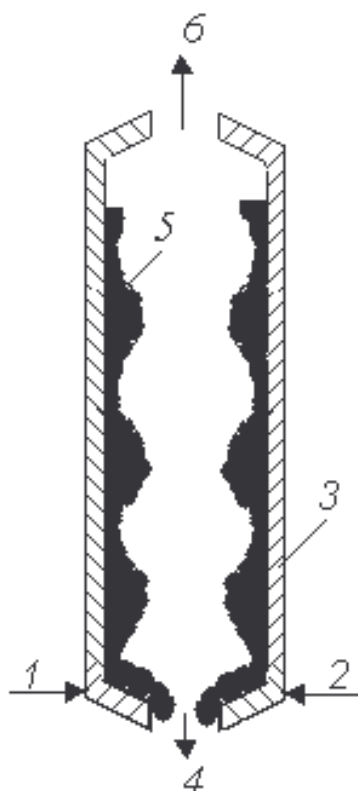
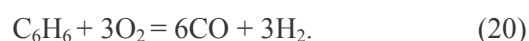
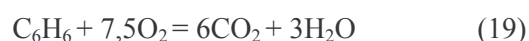
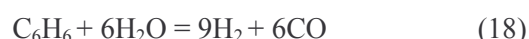
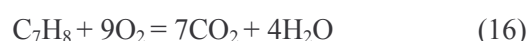
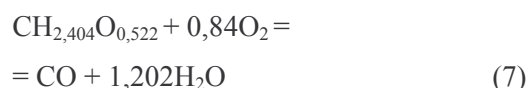


Рис. 1. Одноступенчатая схема парокислородной газификации Александрийского бурого угля: 1 – бурый уголь; 2 – смесь кислорода и водяного пара; 3 – обмуровка; 4 – выход шлака; 5 – шлаковая пленка; 6 – выход синтетического газа.

**Постановка задачи.** 1) Процесс стационарный; 2) газовая смесь в реакторе состоит из кислорода, азота, диоксида и оксида углерода, метана, водяного пара, водорода, бензола и толуола; 3) дисперсная фаза включает в себя  $M_C$  фракций коксовых и  $M_{ash}$  фракций золовых частиц сферической формы. Такое допущение оправдано тем, что внешняя зола и частично внутренняя отделяются при размоле от горючей части натурального топлива. Дальнейший распад коксозольного срукта происходит при высокотемпературном скоростном нагреве за счет перехода золы из твердой фазы в жидкую с последующим отделением углерода от капли; 4) протекание гетерогенных реакций горения и газификации на поверхности коксовых частиц приводит к уменьшению их размера; 5) компонент газовой смеси  $N_2$  не вступает в реакции, а сера остается в частице и подвергается термохимической переработке вместе с фиксированным углеродом; 6) газ и твердая фаза движутся в режиме идеального вытеснения; 7) стехиометрическая схема реакций включает в себя пять гетерогенных реакций:



и пятнадцать гомогенных:



В стехиометрической схеме реакций летучие представлены общей формулой кислородосодержащего соединения  $CH_xO_y$  (для Александрийского бурого угля  $x = 2,404$ ,  $y = 0,522$ ), которое при высокоскоростном нагреве разлагается на газвые компоненты  $C_7H_8$ ,  $CO$  и  $H_2$ . Отличительной особенностью указанной схемы от других является тот факт, что углеводороды  $C_6H_6$  и  $CH_4$  получаются в результате взаимодействия продуктов разложения  $C_7H_8$  и  $H_2$ .

8) Экспериментальные данные [1] показывают, что выход летучих веществ значительно уменьшается с увеличением рабочего давления. В [2] получено выражение, устанавливающее связь между выходом летучих веществ и давлением газа, которое было преобразовано в [3] к следующему виду:

$$V_{лет} = V_{лет,p=1atm} (1 - 0,66 \ln P_g). \quad (21)$$

Из выражения (21) следует, что при давлении газа 4,2 МПа из угольных частиц бурого угля выходит 75% летучих, а 25% остаются в частице и подвергаются термохимической переработке вместе с фиксированным углеродом.

9) Расход золы экспоненциально убывает по высоте реактора за счет миграции золовых частиц из ядра потока в пристеночную зону, форми-

руя при этом пленку жидкого шлака на поверхности обмуровки.

**Основные уравнения.** Система уравнений, описывающая аэродинамику, тепломассообмен и химическое реагирование газодисперсного потока в вертикальном газификаторе, может быть представлена в следующем виде.

Уравнение неразрывности для кислорода:

$$\begin{aligned} \frac{d(u_g C_{O_2})}{dz} = & -6 \sum_{j=1}^{M_c} \frac{\alpha_{D,O_2j} (C_{O_2} - C_{O_2j}^w) \beta_j}{\delta_{Cj}} - 0,5 \cdot 2,239 \cdot 10^{12} C_{CO} C_{H_2O}^{0,5} C_{O_2}^{0,25} \times \\ & \times \exp\left[-167,4 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - 0,5 \cdot 4,4 \cdot 10^{11} T_g^0 C_{CH_4}^{0,5} C_{O_2}^{1,25} \exp\left[-126 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - \\ & - 0,5 \cdot 6,8 \cdot 10^{15} T_g^{-1} C_{H_2}^{0,25} C_{O_2}^{1,5} \exp\left[-167 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - 7,5 \cdot 1,35 \cdot 10^9 C_{C_6H_6}^{-0,1} C_{O_2}^{1,85} \times \\ & \times \exp\left[-125 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - 3 \cdot 1,58 \cdot 10^{15} C_{C_6H_6} C_{O_2} \exp\left[-202,6 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - \\ & - 0,84 \cdot 9,2 \cdot 10^6 T_g C_{O_2} C_{CH_{2,404}O_{0,522}}^{0,5} \exp\left[-80,2 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - \\ & - 9 \cdot 1,6 \cdot 10^8 C_{C_7H_8}^{-0,1} C_{O_2}^{1,85} \exp\left[-125,5 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right]. \end{aligned} \quad (22)$$

Уравнение неразрывности для диоксида углерода:

$$\begin{aligned} \frac{d(u_g C_{CO_2})}{dz} = & 6 \sum_{j=1}^{M_c} \alpha_{D,CO_2j} (C_{CO_2j}^w - C_{CO_2}) \frac{\beta_j}{\delta_{Cj}} + 2,239 \cdot 10^{12} C_{CO} C_{H_2O}^{0,5} C_{O_2}^{0,25} \times \\ & \times \exp\left[-167,4 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + 2,34 \cdot 10^{10} \exp\left[-288,3 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] C_{H_2O} C_{CO}^{0,5} - \\ & - 2,2 \cdot 10^7 \exp\left[-190 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] C_{H_2}^{0,5} C_{CO_2} + 6 \cdot 1,35 \cdot 10^9 C_{C_6H_6}^{-0,1} C_{O_2}^{1,85} \times \\ & \times \exp\left[-125 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + 7 \cdot 1,6 \cdot 10^8 C_{C_7H_8}^{-0,1} C_{O_2}^{1,85} \exp\left[-125,5 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right]. \end{aligned} \quad (23)$$

Уравнение неразрывности для окиси углерода:

$$\begin{aligned} \frac{d(u_g C_{CO})}{dz} = & 6 \sum_{j=1}^{M_c} \alpha_{D,COj} (C_{COj}^w - C_{CO}) \frac{\beta_j}{\delta_{Cj}} - 2,239 \cdot 10^{12} C_{CO} C_{H_2O}^{0,5} C_{O_2}^{0,25} \times \\ & \times \exp\left[-167,4 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - (2,34 \cdot 10^{10} \exp\left[-288,3 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] C_{H_2O} C_{CO}^{0,5} - \\ & - 2,2 \cdot 10^7 \exp\left[-190 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] C_{H_2}^{0,5} C_{CO_2}) + 4,4 \cdot 10^{11} T_g^0 C_{CH_4}^{0,5} C_{O_2}^{1,25} \times \\ & \times \exp\left[-126 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + 8 \cdot 10^7 C_{CH_4}^{0,5} C_{H_2O} \exp\left[-251 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - \\ & - 5,12 \cdot 10^{-14} C_{CO} C_{H_2} \exp\left[-27,3 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + 6 \cdot 1,58 \cdot 10^{15} C_{C_6H_6} C_{O_2} \times \\ & \times \exp\left[-202,6 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + 6 \cdot 8 \cdot 10^8 C_{C_6H_6}^{0,5} C_{H_2O} \exp\left[-251 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + \\ & + 5 \cdot 4,4 \cdot 10^8 C_{C_6H_6} C_{H_2O} \exp\left[-220 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + 9,2 \cdot 10^6 T_g C_{CH_{2,404}O_{0,522}}^{0,5} C_{O_2} \times \\ & \times \exp\left[-80,2 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + 0,522 \cdot 4,26 \cdot 10^6 \times \\ & \times \exp\left[-108 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] C_{CH_{2,404}O_{0,522}}. \end{aligned} \quad (24)$$

Уравнение неразрывности для метана:

$$\begin{aligned} \frac{d(u_g C_{CH_4})}{dz} = & -4,4 \cdot 10^{11} T_g^0 C_{CH_4}^{0,5} C_{O_2}^{1,25} \exp\left[-126 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + \\ & + \sum_{j=1}^{M_c} 7,2 \beta_j \exp\left(-\frac{E_{C+H_2j}}{R_g (t_{Cj} + 273)}\right) \left[ P_{H_2} 10^{-5} - \sqrt{P_{CH_4} 10^{-5} / K_{eq,C+H_2j}} \right] / (\delta_{Cj} \mu_C) - \\ & - \left( 8 \cdot 10^7 C_{CH_4}^{0,5} C_{H_2O} \exp\left[-251 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - 5,12 \cdot 10^{-14} C_{CO} C_{H_2} \times \right. \\ & \times \exp\left[-27,3 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] \left. + 4,4 \cdot 10^8 C_{C_6H_6} C_{H_2O} \exp\left[-220 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + \right. \\ & \left. + 1,04 \cdot 10^{12} C_{C_7H_8} C_{H_2}^{0,5} \exp\left[-247 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] \right), \\ & K_{eq,C+H_2j} = \frac{0,175}{34713} \exp\left(\frac{18400}{1,8(t_{Cj} + 273)}\right). \end{aligned} \quad (25)$$

Уравнение неразрывности для водяного пара:

$$\begin{aligned} \frac{d(u_g C_{H_2O})}{dz} = & -6 \sum_{j=1}^{M_c} \frac{k_{C+H_2Oj} C_{H_2Oj}^w \beta_j}{\delta_{Cj}} + 6,8 \cdot 10^{15} T_g^{-1} C_{H_2}^{0,25} C_{O_2}^{1,5} \exp\left[-167 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - \\ & - \left( 2,34 \cdot 10^{10} \exp\left[-288,3 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] C_{H_2O} C_{CO}^{0,5} - \right. \\ & \left. - 2,2 \cdot 10^7 \exp\left[-190 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] C_{H_2}^{0,5} C_{CO_2} \right) - \\ & - \left( 8 \cdot 10^7 C_{CH_4}^{0,5} C_{H_2O} \exp\left[-251 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - 5,12 \cdot 10^{-14} C_{CO} C_{H_2} \times \right. \\ & \times \exp\left[-27,3 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] \left. - 6 \cdot 8 \cdot 10^8 C_{C_6H_6}^{0,5} C_{H_2O} \exp\left[-251 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - \right. \\ & \left. - 5 \cdot 4,4 \cdot 10^8 C_{C_6H_6} C_{H_2O} \exp\left[-220 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + 3 \cdot 1,35 \cdot 10^9 C_{C_6H_6}^{-0,1} C_{O_2}^{1,85} \times \right. \\ & \times \exp\left[-125 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] \left. + 1,202 \cdot 9,2 \cdot 10^6 T_g C_{O_2} C_{CH_2,404}^{0,5} \exp\left[-80,2 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + \right. \\ & \left. + 4 \cdot 1,6 \cdot 10^8 C_{C_7H_8}^{-0,1} C_{O_2}^{1,85} \exp\left[-125,5 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] \right). \end{aligned} \quad (26)$$

Уравнение неразрывности для водорода:

$$\begin{aligned} \frac{d(u_g C_{H_2})}{dz} = & 6 \sum_{j=1}^{M_c} \frac{k_{C+H_2Oj} C_{H_2Oj}^w \beta_j}{\delta_{Cj}} - 6,8 \cdot 10^{15} T_g^{-1} C_{H_2}^{0,25} C_{O_2}^{1,5} \exp\left[-167 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + \\ & + 2,34 \cdot 10^{10} \exp\left[-288,3 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] C_{H_2O} C_{CO}^{0,5} - \\ & - 2,2 \cdot 10^7 \exp\left[-190 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] C_{H_2}^{0,5} C_{CO_2} + 3 \cdot 8 \cdot 10^7 C_{CH_4}^{0,5} C_{H_2O} \times \\ & \times \exp\left[-251 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - 3 \cdot 5,12 \cdot 10^{-14} C_{CO} C_{H_2} \exp\left[-27,3 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + \\ & + 3 \cdot 1,58 \cdot 10^{15} C_{C_6H_6} C_{O_2} \exp\left[-202,6 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + \\ & + 2 \cdot 4,4 \cdot 10^{11} T_g^0 C_{CH_4}^{0,5} C_{O_2}^{1,25} \exp\left[-126 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + \\ & + 9 \cdot 8 \cdot 10^8 C_{C_6H_6}^{0,5} C_{H_2O} \exp\left[-251 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] + \\ & + 6 \cdot 4,4 \cdot 10^8 C_{C_6H_6} C_{H_2O} \exp\left[-220 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -2 \sum_{j=1}^{M_c} 7,2\beta_j \exp\left(-\frac{E_{C+H_2j}}{R_g(t_{Cj} + 273)}\right) \left[ P_{H_2} 10^{-5} - \sqrt{P_{CH_4} 10^{-5} / K_{eq,C+H_2j}} \right] / (\delta_{Cj} \mu_C) + \\
& + 0,929115 \cdot 4,26 \cdot 10^6 \exp\left[-108 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] C_{CH_2,404O_{0,522}} - \\
& - 1,04 \cdot 10^{12} C_{C_7H_8} C_{H_2}^{0,5} \exp\left[-247 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right].
\end{aligned} \quad (27)$$

Уравнение неразрывности для азота:

$$\frac{d(u_g C_{N_2})}{dz} = 0. \quad (28)$$

Уравнение неразрывности для бензола:

$$\begin{aligned}
& \frac{d(u_g C_{C_6H_6})}{dz} = -1,58 \cdot 10^{15} C_{C_6H_6} C_{O_2} \exp\left[-202,6 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] - \\
& - 8 \cdot 10^8 C_{C_6H_6}^{0,5} C_{H_2O} \exp\left[-251 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] - 4,4 \cdot 10^8 C_{C_6H_6} C_{H_2O} \times \\
& \times \exp\left[-220 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] - 1,35 \cdot 10^9 C_{C_6H_6}^{0,1} C_{O_2}^{1,85} \exp\left[-125 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] + \\
& + 1,04 \cdot 10^{12} C_{C_7H_8} C_{H_2}^{0,5} \exp\left[-247 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right].
\end{aligned} \quad (29)$$

Уравнение неразрывности для толуола:

$$\begin{aligned}
& \frac{d(u_g C_{C_7H_8})}{dz} = 0,0682285 \cdot 4,26 \cdot 10^6 \exp\left[-108 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] C_{CH_2,404O_{0,522}} - \\
& - 1,04 \cdot 10^{12} C_{C_7H_8} C_{H_2}^{0,5} \exp\left[-247 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] - \\
& - 1,6 \cdot 10^8 C_{C_7H_8}^{0,1} C_{O_2}^{1,85} \exp\left[-125,5 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right].
\end{aligned} \quad (30)$$

Уравнение неразрывности для кислородосодержащего соединения  $CH_{2,404}O_{0,522}$ :

$$\begin{aligned}
& \frac{d(u_g C_{CH_{2,404}O_{0,522}})}{dz} = -4,26 \cdot 10^6 \exp\left[-108 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] C_{CH_{2,404}O_{0,522}} - \\
& - 9,2 \cdot 10^6 T_g C_{O_2} C_{CH_{2,404}O_{0,522}}^{0,5} \exp\left[-80,2 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] + \\
& + \sum_{j=1}^{M_c} \left( \alpha_1 k_{01j} \exp\left[-104,6 \cdot 10^3 / (R_g(t_{pj} + 273))\right] + \alpha_2 k_{02j} \exp\left[-167 \cdot 10^3 / (R_g(t_{pj} + 273))\right] \right) \times \\
& \times \frac{B_{gorj}}{\mu_{CH_{2,404}O_{0,522}} u_{pj} f_r}, \quad \alpha_1 = 0,3; \quad \alpha_2 = 0,82, \quad \text{где}
\end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned}
& B_{gorj} = B_{gorj0} - \int_0^{H_r} \left( k_{01j} \exp\left[-104,6 \cdot 10^3 / (R_g(t_{pj} + 273))\right] + \right. \\
& \left. + k_{02j} \exp\left[-167 \cdot 10^3 / (R_g(t_{pj} + 273))\right] \right) \frac{dz}{u_{pj}} [4].
\end{aligned} \quad (32)$$

Уравнения неразрывности твердой фазы:

- частицы кокса фракции  $j$ :

$$\frac{d(\beta_j u_{pj})}{dz} = - \left[ (k_{C+O_2j} + 2k_{C+0.5O_2j}) C_{O_2j}^w + k_{C+CO_2j} C_{CO_2j}^w + k_{C+H_2Oj} C_{H_2Oj}^w \right] \frac{6\mu_C \beta_j}{\delta_{Cj} \rho_{Cj}} -$$



$$-7,2\beta_j \exp\left(-\frac{E_{C+H_2j}}{R_g(t_{Cj} + 273)}\right) \left[ P_{H_2} 10^{-5} - \sqrt{P_{CH_4} 10^{-5} / K_{eq,C+H_2j}} \right] / (\delta_{Cj} \rho_{Cj}) -$$

$$-\left( k_{01j} \exp\left[-104,6 \cdot 10^3 / (R_g(t_{pj} + 273))\right] + k_{02j} \exp\left[-167 \cdot 10^3 / (R_g(t_{pj} + 273))\right] \right) \frac{B_{goj}}{u_{pj} \rho_{Cj} f_r};$$

- частиц золы фракции  $s$ :

$$B_{ps} = B_{ps0} \exp(-\eta z), \quad (33)$$

где  $\eta$  – постоянная спада экспоненты,  $1/m$ .

Концентрации газовых компонентов на поверхности коксовой частицы  $j$ , константы скоростей гетерогенных реакций и коэффициенты массообмена находятся по формулам [5, 6]:

$$C_{O_2j}^w = \frac{\alpha_{D,O_2j} C_{O_2}}{\alpha_{D,O_2j} + k_{C+O_2j} + k_{C+0,5O_2j}}, \quad C_{CO_2j}^w = \frac{\alpha_{D,CO_2j} C_{CO_2} + k_{C+O_2j} C_{O_2j}^w}{\alpha_{D,CO_2j} + k_{C+CO_2j}}, \quad C_{H_2Oj}^w = \frac{\alpha_{D,H_2Oj} C_{H_2O}}{\alpha_{D,H_2Oj} + k_{C+H_2Oj}},$$

$$C_{COj}^w = \frac{\alpha_{D,COj} C_{CO} + 2(k_{C+0,5O_2j} C_{O_2j}^w + k_{C+CO_2j} C_{CO_2j}^w) + k_{C+H_2Oj} C_{H_2Oj}^w}{\alpha_{D,COj}}, \quad \alpha_{D,O_2j} = \frac{D_{O_2 \rightarrow cm} Nu_j}{\delta_{Cj}},$$

$$\alpha_{D,CO_2j} = \frac{D_{CO_2 \rightarrow cm} Nu_j}{\delta_{Cj}}, \quad \alpha_{D,COj} = \frac{D_{CO \rightarrow cm} Nu_j}{\delta_{Cj}}, \quad \alpha_{D,H_2Oj} = \frac{D_{H_2O \rightarrow cm} Nu_j}{\delta_{Cj}},$$

$$Nu_j = 2 + 0,51 Re_{Cj}^{0,52} Pr_g^{0,33}, \quad \delta_{Cj} = \delta_{C0j} \sqrt[3]{\frac{\beta_j u_{Cj}}{\beta_{0j} u_{C0j}}},$$

$$k_{xj} = \zeta_x \exp\left[-E_x / (R_g(t_{pj} + 273))\right], \quad (34)$$

где индекс  $x=1-4$  относится к гетерогенным реакциям:  $C + O_2 = CO_2$ ,  $2C + O_2 = 2CO$ ,  $C + CO_2 = 2CO$  и  $C + H_2O = CO + H_2$ .

Уравнение переноса импульса частиц фракции  $i$ :

$$\frac{d(\beta_i u_{pi}^2)}{dz} = \frac{F_{ai}}{\rho_{pi}} - g\beta_i, \quad F_{ai} = \frac{3}{4} \rho_g C_d |u_g - u_{pi}| (u_g - u_{pi}) \frac{\beta_i}{\delta_i}. \quad (35)$$

Уравнение сохранения количества движения газовой фазы:

$$\frac{d(\rho_g u_g^2)}{dz} = -\frac{dP_g}{dz} - g\rho_g - \sum_{i=1}^{M_C+M_{ash}} F_{ai}. \quad (36)$$

Уравнение сохранения энергии несущей среды:

$$\frac{d(\rho_g u_g c_g t_g)}{dz} = 6 \sum_{i=1}^{M_C+M_{ash}} h_{convi} (t_{pi} - t_g) \frac{\beta_i}{\delta_i} - Q_{rad,g \rightarrow slag} + \sum_{i=1}^{M_C+M_{ash}} Q_{rad,i \rightarrow g} +$$

$$+ 2,239 \cdot 10^{12} C_{CO} C_{H_2O}^{0,5} C_{O_2}^{0,25} \exp\left[-167,4 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] Q_{CO+O_2} +$$

$$+ 6,8 \cdot 10^{15} T_g^{-1} C_{H_2}^{0,25} C_{O_2}^{1,5} \exp\left[-167 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] Q_{H_2+O_2} +$$

$$+ 4,4 \cdot 10^{11} T_g^0 C_{CH_4}^{0,5} C_{O_2}^{1,25} \exp\left[-126 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] Q_{CH_4+O_2} +$$

$$+ 1,58 \cdot 10^{15} C_{C_6H_6} C_{O_2} \exp\left[-202,6 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] Q_{C_6H_6+O_2} +$$

$$+ \left( 2,34 \cdot 10^{10} \exp\left[-288,3 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] C_{H_2O} C_{CO}^{0,5} - \right.$$

$$\left. - 2,2 \cdot 10^7 \exp\left[-190 \cdot 10^3 / (R_g(t_g + 273))\right] C_{H_2}^{0,5} C_{CO_2} \right) Q_{CO+H_2O} -$$

$$\begin{aligned}
& -\left(8 \cdot 10^7 C_{\text{CH}_4}^{0,5} C_{\text{H}_2\text{O}} \exp\left[-251 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] - 5,12 \cdot 10^{-14} C_{\text{CO}} C_{\text{H}_2} \times \right. \\
& \quad \left. \times \exp\left[-27,3 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right]\right) Q_{\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}} - \\
& \quad - 8 \cdot 10^8 C_{\text{C}_6\text{H}_6}^{0,5} C_{\text{H}_2\text{O}} \exp\left[-251 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] Q_{\text{C}_6\text{H}_6 + \text{H}_2\text{O}} - \\
& \quad - 4,4 \cdot 10^8 C_{\text{C}_6\text{H}_6} C_{\text{H}_2\text{O}} \exp\left[-220 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] Q'_{\text{C}_6\text{H}_6 + \text{H}_2\text{O}} + \\
& \quad + 1,35 \cdot 10^9 C_{\text{C}_6\text{H}_6}^{0,1} C_{\text{O}_2}^{1,85} \exp\left[-125 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] Q'_{\text{C}_6\text{H}_6 + \text{O}_2} - \\
& \quad - 1,04 \cdot 10^{12} C_{\text{C}_7\text{H}_8} C_{\text{H}_2}^{0,5} \exp\left[-247 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] Q_{\text{C}_7\text{H}_8 + \text{H}_2} + \\
& \quad + 1,6 \cdot 10^8 C_{\text{C}_7\text{H}_8}^{0,1} C_{\text{O}_2}^{1,85} \exp\left[-125,5 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] Q_{\text{C}_7\text{H}_8 + \text{O}_2} + \\
& \quad + 9,2 \cdot 10^6 T_g C_{\text{O}_2} C_{\text{CH}_2,404\text{O}_{0,522}}^{0,5} \exp\left[-80,2 \cdot 10^3 / (R_g (t_g + 273))\right] Q_{\text{CH}_2,404\text{O}_{0,522} + \text{O}_2}. \quad (37)
\end{aligned}$$

Уравнение теплового баланса частиц кокса фракции  $j$ :

$$\begin{aligned}
\frac{d(\beta_j u_{pj} c_{pj} t_{pj})}{dz} = & \left[ (k_{\text{C}+\text{O}_2j} Q_{\text{C}+\text{O}_2} + k_{\text{C}+\text{O}_2,5\text{O}_2j} Q_{\text{C}+\text{O}_2,5\text{O}_2}) C_{\text{O}_2j}^w - k_{\text{C}+\text{CO}_2j} C_{\text{CO}_2j}^w Q_{\text{C}+\text{CO}_2} - \right. \\
& \left. - k_{\text{C}+\text{H}_2\text{O}j} C_{\text{H}_2\text{O}j}^w Q_{\text{C}+\text{H}_2\text{O}} - h_{\text{conv}j} (t_{pj} - t_g) \right] \frac{6\beta_j}{\delta_{Cj} \rho_{Cj}} - \frac{Q_{\text{rad}j \rightarrow \text{slag}}}{\rho_{Cj}} - \frac{Q_{\text{rad}j \rightarrow g}}{\rho_{Cj}} - \frac{Q_{\text{rerad}j}}{\rho_{Cj}} + \\
& + 7,2\beta_j \exp\left(-\frac{E_{\text{C}+\text{H}_2j}}{R_g (t_{Cj} + 273)}\right) \left[ P_{\text{H}_2} 10^{-5} - \sqrt{P_{\text{CH}_4} 10^{-5} / K_{\text{eq,C}+\text{H}_2j}} \right] \frac{Q_{\text{C}+\text{H}_2}}{\rho_{Cj}} - \\
& - c_{pj} t_{pj} \left( k_{01j} \exp\left[-104,6 \cdot 10^3 / (R_g (t_{pj} + 273))\right] + k_{02j} \exp\left[-167 \cdot 10^3 / (R_g (t_{pj} + 273))\right] \right) \frac{B_{\text{got}j}}{u_{pj} \rho_{Cj} f_r}. \quad (38)
\end{aligned}$$

Уравнение теплового баланса частиц золы фракции  $s$ :

$$\frac{d(\beta_s u_{ps} c_{ps} t_{ps})}{dz} = -h_{\text{conv}s} (t_{ps} - t_g) \frac{6\beta_s}{\delta_s \rho_{\text{ash}s}} - \frac{Q_{\text{rads} \rightarrow \text{slag}}}{\rho_{\text{ash}s}} - \frac{Q_{\text{rads} \rightarrow g}}{\rho_{\text{ash}s}} - \frac{Q_{\text{rerads}}}{\rho_{\text{ash}s}} - c_{ps} t_{ps} \left| \frac{dB_{ps}}{dz} \right|. \quad (39)$$

Левые части уравнений (22)-(31), (33) (первое уравнение) учитывают конвективный перенос вещества в аксиальном направлении, правые – влияние гетерогенных (1)-(5) и гомогенных (7)-(20) реакций и приращение (убыль, см. (33)) массы компонентов газа, связанное с выходом пиролизных газов в виде кислородосодержащего соединения  $\text{CH}_2,404\text{O}_{0,522}$  с последующим его распадом согласно (6) [7–16]. В уравнениях движения фаз (35), (36) фигурируют градиент давления газа, силы тяжести и межфазного взаимодействия. Правая часть уравнения (37) учитывает конвективный и радиационный теплообмен между частицами и газом, лучистое тепло, переданное газовой фазой шлаковой пленке и тепловые эффекты гомогенных реакций (7)-(20). Слагаемые уравнения (38) описывают конвективный тепло-

обмен дисперсной фазы с несущей средой, тепловые эффекты гетерогенных реакций (1)-(5), лучистый теплообмен кокса со шлаковой пленкой и газом, переизлучение между частицами и уменьшение энтальпии коксовых частиц за счет выхода летучих веществ. Температура золовых фракций (39) определяется конвективным и радиационным теплообменом между золой и газовой смесью, лучистым теплообменом дисперсной фазы со шлаковой пленкой, межфракционным переизлучением, переносом энтальпии золы из ядра потока в пристеночную зону.

**Численные результаты расчетов одностадийного процесса газификации.** Рассмотрим рабочий процесс парокислородной газификации ( $B_{\text{H}_2\text{O}} = 400$  кг/ч;  $B_{\text{O}_2} = 6000$  кг/ч;  $B_{\text{N}_2} = 800$  кг/ч) сухой пыли бурого угля Александрыйского ме-



сторождения ( $C_{\phi}^r = 32,64\%$ ,  $C_{\text{лет}}^r = 23,66\%$ ,  $S^r = 3,26\%$ ,  $H^r = 4,74\%$ ,  $O^r = 16,48\%$ ,  $N^r = 0,82\%$ ,  $W^r = 4\%$ ,  $A^r = 14,4\%$ ;  $\delta_{\text{ash}} = 0,08$  мм,  $\delta_c = 0,1$  мм) в пилотной установке высотой 4 м, сечением  $0,49$  м<sup>2</sup> и производительностью по углю  $7639$  кг/ч.

Основные трудности, возникающие при организации данного процесса, связаны с выбором соотношений  $B_{O_2}/B_{\text{fuel}}$  и  $B_{H_2O}/B_{\text{fuel}}$ , величины которых непосредственно влияют на состав генераторного газа и степень конверсии углерода и зависят от марки исходного угля. На основе широких численных исследований газификации пыли Александрийского бурого угля найдены оптимальные значения указанных отношений:  $B_{O_2}/B_{\text{бу}} = 0,785$  и  $B_{H_2O}/B_{\text{бу}} = 0,052$ . Эти отношения обеспечивают состав синтетического газа на выходе из газификатора ( $CO = 60,2\%$ ,  $H_2 = 33\%$ ,  $CO_2 = 1,8\%$ ,  $CH_4 = 0,036\%$ ,  $H_2O = 1\%$ ,  $N_2 = 3,97\%$ ), характерный для технологии Shell (рис. 2в, кривые 1-6).

Реактор можно условно разделить на две характерные по своему назначению зоны: окислительную и восстановительную. В кислородной области происходит быстрый прогрев частиц бурого угля и газа, поступающих в газогенератор из горелочных устройств, за счет излучения шлаковой пленки, о чем свидетельствуют отрицательные значения лучистых потоков между газозвесью и шлаком (рис. 3а, кривые 2-4). Это способствует интенсивному выделению летучих веществ (рис. 4а) с последующим их выгоранием согласно экзотермическим реакциям (7)-(10), (16), (19), (20). В результате концентрация кислорода в газе быстро уменьшается, а содержание балласта ( $CO_2$ ,  $H_2O$ ) и температуры несущей среды, кокса и шлака резко возрастают и достигают своих максимальных значений (рис. 2а, кривые 3, 5, 7; рис. 5а, кривые 1, 3, 4). Здесь основными источниками излучения газодисперсного потока на настенные экраны реактора является несущая среда с максимальным содержанием трехатомных газов и частицы углерода, в отличие от золы, которая поглощает лучистую энергию шлаковой пленкой (рис. 3а, кривые 2-4).

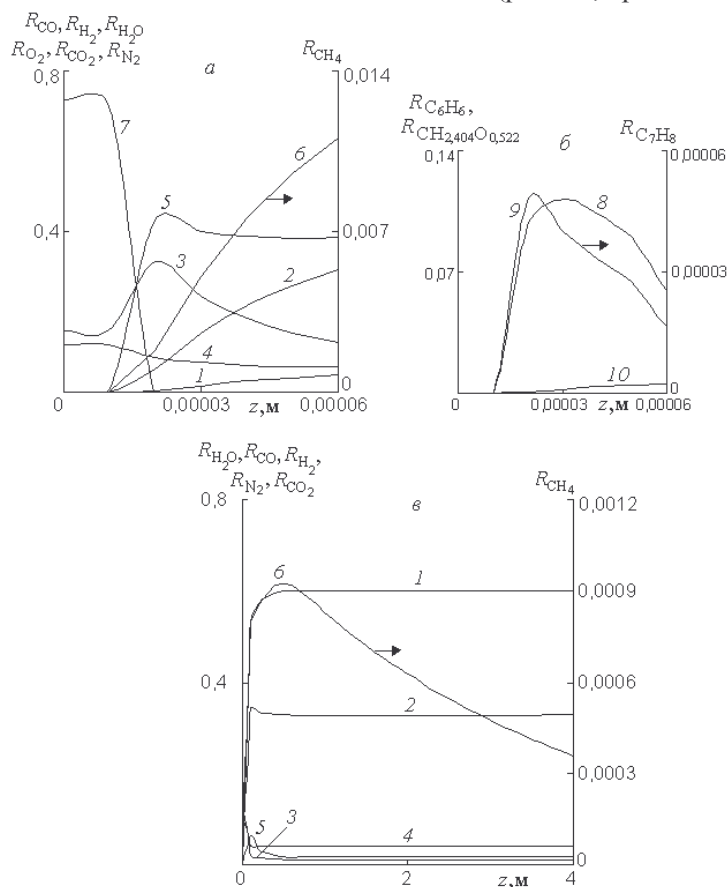


Рис. 2. Распределение объемных долей компонентов газа по высоте реактора:

1 – CO; 2 – H<sub>2</sub>; 3 – H<sub>2</sub>O; 4 – N<sub>2</sub>; 5 – CO<sub>2</sub>; 6 – CH<sub>4</sub>; 7 – O<sub>2</sub>; 8 – CH<sub>2,4O<sub>4</sub>O<sub>0,522</sub></sub>; 9 – C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>; 10 – C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>.

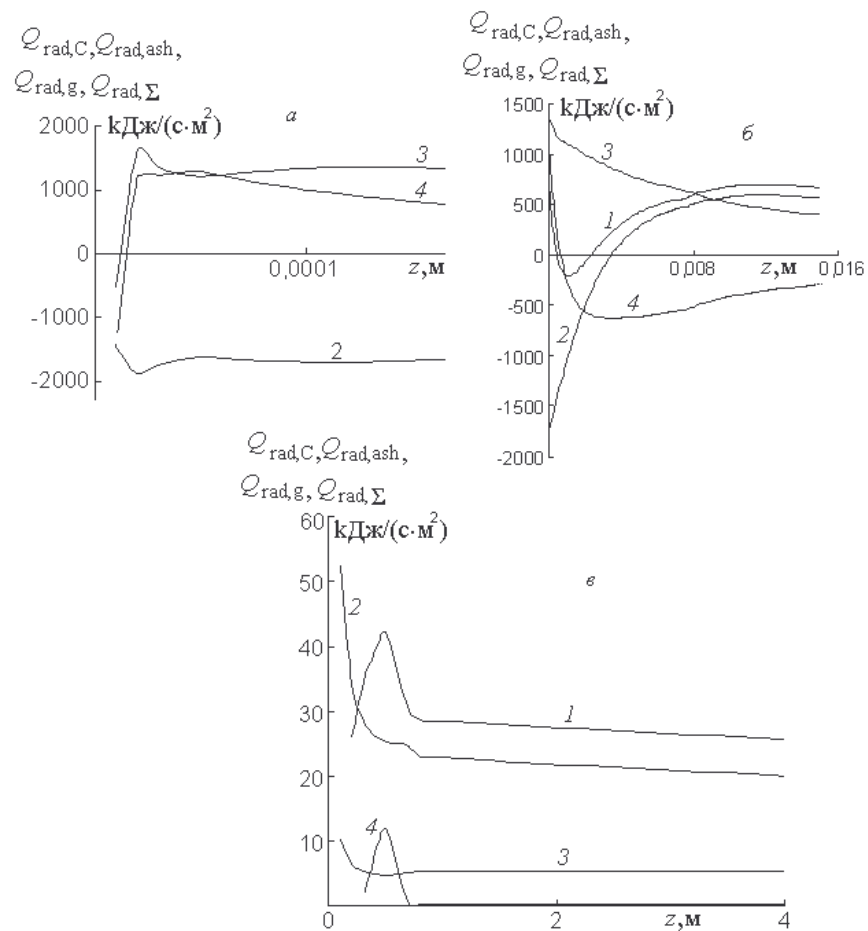


Рис. 3. Распределение суммарного лучистого потока (1) и удельных тепловых потоков излучения газа (3), частиц кокса (4) и золы (2) на шлаковую пленку по высоте реактора.

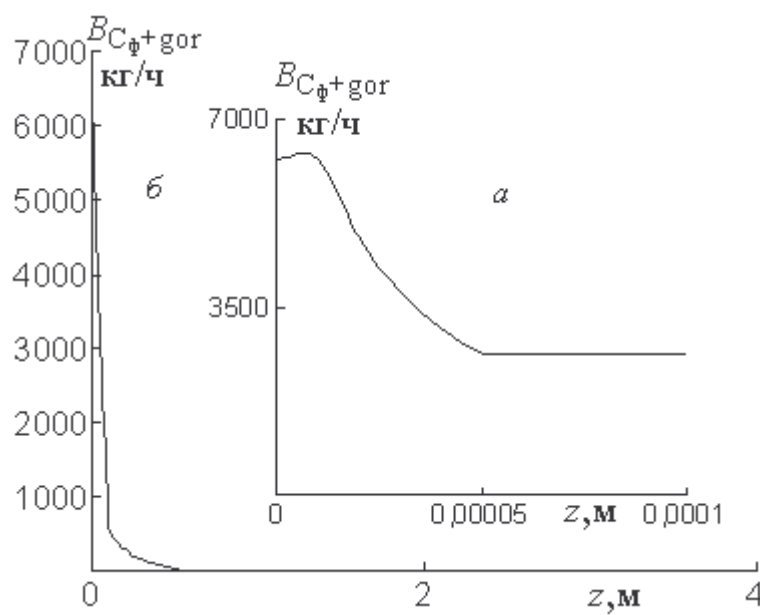


Рис. 4. Распределение расхода сухой беззольной массы (горючей) бурого угля по высоте реактора.

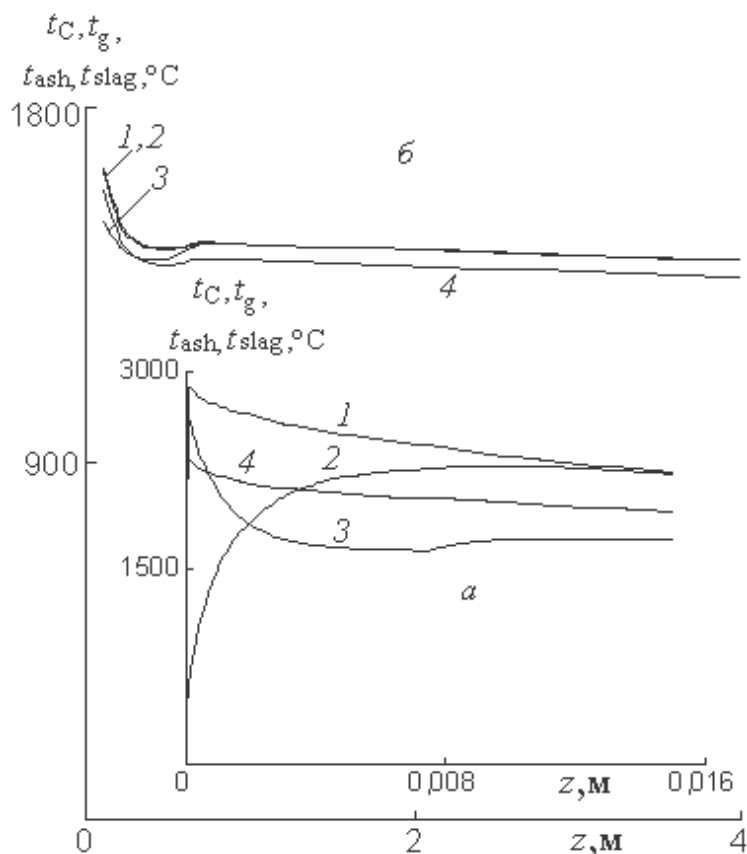


Рис. 5. Распределение температур газа (1), частиц золы (2), кокса (3) и шлаковой пленки (4) по высоте реактора.

Не все летучие выходят в кислородной зоне. Остаток пиролизных газов выделяется в восстановительной области в виде кислородосодержащего соединения  $\text{CH}_{2,404}\text{O}_{0,522}$ , которое распадается на компоненты  $\text{CO}$ ,  $\text{C}_7\text{H}_8$  и  $\text{H}_2$  согласно (6), после чего толуол, вступая в реакцию с водородом, образует бензол и метан (см. (15); рис. 2а, б, кривые 1, 2, 6, 8-10). Далее продукты вторичного пиролиза  $\text{C}_6\text{H}_6$  и  $\text{CH}_4$  реагируют с  $\text{H}_2\text{O}$  согласно (13), (17), (18) с образованием  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2$  и  $\text{CH}_4$ . Кроме того, в рассматриваемой зоне протекают эндотермические гетерогенные реакции (3) и (4), благодаря чему температура и расход коксовых частиц и содержание балласта ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ) уменьшаются, в то время как температура золы из-за межфазного теплообмена и межфракционного переизлучения возрастает (рис. 2а, кривые 3, 5; рис. 5а, кривые 2, 3; рис. 4б). Это, несомненно, сказывается на перераспределении радиационных тепловых потоков между компонентами газозвеси и шлаком: зола становится источником излучения тепла на настенные экраны реактора, а кокс поглощает лучистую энергию

шлака (рис. 3б, кривые 2, 4).

Следует отметить, что основное количество фиксированного углерода ( $\varphi=83\%$ ) реагирует в области максимальных тепловыделений в очень узком диапазоне  $z < 0,1\text{ м}$  (рис. 4б), где гетерогенные реакции (3) и (4) протекают преимущественно в диффузионной области реагирования.

В интервале  $0,1\text{ м} < z < 4\text{ м}$  наблюдается незначительное понижение температуры фаз – всего лишь на  $222^\circ\text{C}$  (рис. 5б) из-за слабой конверсии углерода и низкого суммарного теплового потока излучения на экраны газогенератора, величина которого не превышает  $42\text{ кДж}/(\text{с}\cdot\text{м}^2)$  (рис. 3в, кривая 1). Такое малое значение величины  $Q_{\text{rad},\Sigma}$  обусловлено тремя факторами: 1) в диапазоне  $0\text{ м} < z < 0,6\text{ м}$  степень конверсии углерода приближается к 100% (рис. 4б), вследствие чего величина  $Q_{\text{rad},\text{C}}$  стремится к нулю (рис. 3в, кривая 4); 2) низкая излучательная способность газа связана с малым содержанием  $\text{CO}_2$  и  $\text{H}_2\text{O}$  в генераторном газе (рис. 2в, кривые 3, 5); 3) из-за уменьшения расхода золы по высоте реактора величина  $Q_{\text{rad},\text{ash}}$  снижается (рис. 3в, кривая 2; рис. 6).

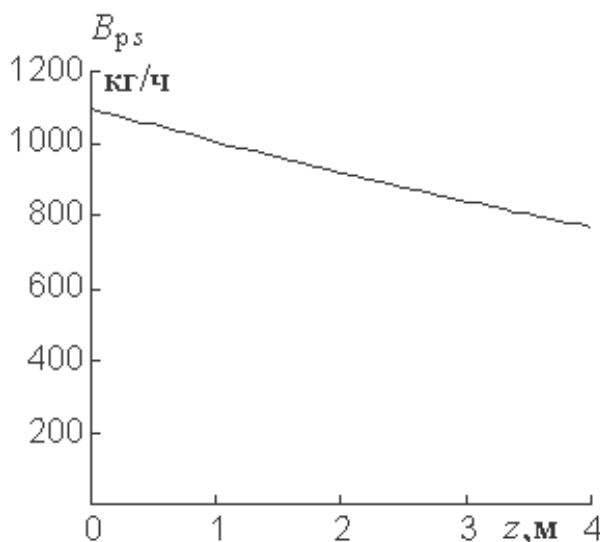


Рис. 6. Распределение расхода золовых частиц по высоте реактора.

На выходе из газогенератора получается синтетический газ, содержание CO в котором существенно выше, чем H<sub>2</sub>. Отношение объемных долей CO/H<sub>2</sub> составляет 1,82, что характерно для процесса Shell (рис. 2в, кривые 1, 2). При этом температуры уходящего газодисперсного потока 1414°C и шлаковой пленки 1372°C значительно превышают температуру жидкоплавкого состояния золы 1231°C (рис. 5б). Это говорит о том, что жидкий шлак формируется по всей высоте газификатора, а его температура изменяется по оси  $z$  от 2314°C до 1372°C (рис. 5, кривая 4). Данный фактор необходимо учитывать при разработке конструкции торкрета реактора, который должен состоять из двух слоев. Первый – карбидокремниевая масса, которая набивается на ошипованные поверхности нагрева газификатора. Вторым слоем, непосредственно соприкасающимся с жидким шлаком и работающим в области высоких температур, является стабилизированная окись циркония ZrO<sub>2</sub> с высокой температурой огнеупорности 2500°C и температурой начала деформации под нагрузкой 2200-2400°C.

**Выводы.** 1. Предложенная модель позволяет получить детальную информацию о геометрических, аэродинамических, тепловых и физико-химических параметрах парокислородной газификации мелкодисперсной сухой пыли Александрийского бурого угля, что может быть полезно

при конструировании высокотемпературных точных реакторов на стадиях эскизного и технического проектирования.

2. Найдены оптимальные значения отношений  $B_{O_2}/B_{бу} = 0,785$  и  $B_{H_2O}/B_{бу} = 0,052$ , которые обеспечивают состав синтетического газа на выходе из газификатора с высоким суммарным содержанием CO и H<sub>2</sub> – 93,2%, низкой концентрацией балласта (CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O) – 2,8%, степенью конверсии углерода 99,9% и калорийностью 11,17 МДж/нм<sup>3</sup>, что характерно для технологии Shell.

3. В окислительной зоне максимальная температура жидкого шлака составляет 2314°C. На основании этого при разработке конструкции обмуровки рекомендуется использовать двухслойный торкрет. Первый слой обмуровки, работающий в области пониженных температур, выполняется из карбидокремниевой массы, которая набивается на ошипованные поверхности нагрева газификатора. Второй слой, непосредственно соприкасающийся с жидким шлаком и работающий в зоне высоких температур, изготавливается из стабилизированной окиси циркония ZrO<sub>2</sub>. Так как температура шлака 1372-2314°C превышает температуру жидкоплавкого состояния золы 1231°C, то торкрет необходимо выполнять по всей высоте реактора.

4. В зоне максимальных температур фаз основными источниками передачи тепла экранам газогенератора являются газ – 1595 кДж/(с·м<sup>2</sup>) и углерод – 1161 кДж/(с·м<sup>2</sup>), в то время как зола поглощает тепловую энергию шлаковой пленкой.

5. Основное количество фиксированного углерода ( $\varphi=83\%$ ) реагирует в диффузионной области в зоне максимальных тепловыделений в очень узком диапазоне  $z < 0,1$  м.

6. Дальнейшее решение проблемы развития методов математического моделирования двухфазных полидисперсных химически реагирующих потоков видится в расширении стехиометрической схемы за счет включения в нее дополнительных гомогенных и гетерогенных реакций (таких, например, как  $CH_4 + 2O_2 = CO_2 + 2H_2O$ ,  $C + 2H_2O = CO_2 + 2H_2$  и т.п.) и изучения их влияния на рассматриваемый процесс.

1. Anthony, D.B., Howard, J.B., Hottel, H.C., and Meissner, H.P. Devolatilization and Hydrogasification of Bituminous Coal // *Fuel*. – 1976. – Vol. 55. – Pp. 121–128.
2. Anthony D.B., and Howard J.B. Coal Devolatilization and Hydrogasification // *AIChE*. – 1976. – Vol. 22. – Pp. 625–656.
3. Wen C.Y., Chaung T.Z. Entrainment Coal Gasification Modeling // *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* – 1979. – Vol. 18. – № 4. – Pp. 684–695.
4. Annamalai K. and Ryan W. Interactive processes in gasification and combustion. 2. Isolated carbon, coal and porous char particles // *Progress in energy and combustion science*. – 1993. – Vol. 19(5). – Pp. 383–446.
5. Rokhman B.B. Modeling and numerical investigation of the process of vapor-oxygen gasification of solid fuels in a vertical flow reactor under pressure // *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. – 2014. – Vol. 87. – No. 5. – Pp. 1103–1115.
6. Померанцев В. В., Арефьев К. И., Ахмедов Д. Б. и др. Основы практической теории горения. Л.: Энергоатомиздат, 1986. – 312 с.
7. Lee, H., Choi, S., Paek, M. A simple process modelling for a dry-feeding entrained bed coal gasifier // *Proc. Inst. Mech. Eng. A J. Power Energy* 2011. Vol. 225. Pp. 74–84.
8. Ma J., Zitney S.E. CFD modeling of entrained-flow gasifiers with improved physical and chemical submodels // *Energy Fuels* 2012. Vol. 26. Pp. 7195–7219.
9. Gómes-Barea A., Leckner B. Modeling of biomass gasification in fluidized bed // *Progress in Energy and Combustion Science*. 2010. Vol. 36. Pp. 449–509.
10. Westbrook, C.K.; Dryer, F.L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames // *Combust. Sci. Technol.* 1981. Vol. 27. Pp. 31–43.
11. Jones, W.P.; Lindstedt, R.P. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion // *Combust. Flame* 1988. Vol. 73. Pp. 233–249.
12. Bustanmante, F.; Enick, R.M.; Killmeyer, R.P.; Howard, B.H.; Rothenberger, K.S.; Cugini, A.V.; Morreale, B.D.; Ciocco, M.V. Uncatalyzed and wall-catalyzed forward water-gas shift reaction kinetics // *AIChE J.* 2005. Vol. 51. Pp. 1440–1454.
13. Jess, A. Mechanisms and kinetics of thermal reactions of aromatic hydrocarbons from pyrolysis of solid fuels // *Fuel* 1996. Vol. 75. Pp. 1441–1448.
14. Turns, S.R. *An Introduction to Combustion, Concepts and Applications*, 2nd ed.; McGraw-Hill: Singapore. 2006.
15. Virks, P.S.; Chambers, L.E.; Woebecke, H.N. Thermal hydrogasification aromatic compounds // *Adv. Chem. Ser.* 1974. Vol. 131. Pp. 237–258.
16. Petersen, I.; Werther, J. Experimental investigation and modeling of gasification of sewage sludge in the circulating fluidized bed // *Chem. Eng. Process.* 2005. Vol. 44. Pp. 717–736.

## REFERENCES

1. Anthony, D.B., Howard, J.B., Hottel, H.C., and Meissner, H.P. Devolatilization and Hydrogasification of Bituminous Coal // *Fuel*. – 1976. – Vol. 55. – Pp. 121–128. (Eng)
2. Anthony D.B., and Howard J.B. Coal Devolatilization and Hydrogasification // *AIChE*. – 1976. – Vol. 22. – Pp. 625–656.
3. Wen C.Y., Chaung T.Z. Entrainment Coal Gasification Modeling // *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* – 1979. – Vol. 18. – № 4. – Pp. 684–695. (Eng)
4. Annamalai K. and Ryan W. Interactive processes in gasification and combustion. 2. Isolated carbon, coal and porous char particles // *Progress in energy and combustion science*. – 1993. – Vol. 19(5). – Pp. 383–446. (Eng)
5. Rokhman B.B. Modeling and numerical investigation of the process of vapor-oxygen gasification of solid fuels in a vertical flow reactor under pressure // *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. – 2014. – Vol. 87. – No. 5. – Pp. 1103–1115. (Rus)
6. Pomerantsev V.V., Arefev K.I., Akhmedov D.B. et al. *Basics of practical combustion theory*. – L.: Energoatomisdat, 1986. – 312 p. (Rus)
7. Lee, H., Choi, S., Paek, M. A simple process modelling for a dry-feeding entrained bed coal gasifier // *Proc. Inst. Mech. Eng. A J. Power Energy*. – 2011. – Vol. 225. – Pp. 74–84. (Eng)
8. Ma J., Zitney S.E. CFD modeling of entrained-flow gasifiers with improved physical and chemical submodels // *Energy Fuels*. – 2012. – Vol. 26. – Pp. 7195–7219. (Eng)
9. Gómes-Barea A., Leckner B. Modeling of biomass gasification in fluidized bed // *Progress in Energy and Combustion Science*. – 2010. – Vol. 36. – Pp. 449–509. (Eng)
10. Westbrook, C.K.; Dryer, F.L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames // *Combust. Sci. Technol.* – 1981. – Vol. 27. – Pp. 31–43. (Eng)
11. Jones, W.P.; Lindstedt, R.P. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion // *Combust. Flame*. – 1988. – Vol. 73. – Pp. 233–249. (Eng)
12. Bustanmante, F.; Enick, R.M.; Killmeyer, R.P.; Howard, B.H.; Rothenberger, K.S.; Cugini, A.V.; Morreale, B.D.; Ciocco, M.V. Uncatalyzed and wall-catalyzed forward water-gas shift reaction kinetics // *AIChE J.* – 2005. – Vol. 51. – Pp. 1440–1454. (Eng)
13. Jess, A. Mechanisms and kinetics of thermal reactions of aromatic hydrocarbons from pyrolysis of solid fuels // *Fuel*. – 1996. – Vol. 75. – Pp. 1441–1448. (Eng)
14. Turns, S.R. *An Introduction to Combustion, Concepts and Applications*, 2nd ed.; McGraw-Hill: Singapore. 2006. (Eng)
15. Virks, P.S.; Chambers, L.E.; Woebecke, H.N. Thermal hydrogasification aromatic compounds // *Adv. Chem. Ser.* – 1974. – Vol. 131. – Pp. 237–258. (Eng)
16. Petersen, I.; Werther, J. Experimental investigation and modeling of gasification of sewage sludge in the circulating fluidized bed // *Chem. Eng. Process.* – 2005. – Vol. 44. – Pp. 717–736. (Eng)



**Б.Б.Рохман**, докт.техн.наук (Інститут вугільних енерготехнологій НАН України, Київ), **В.Г.Вифатнюк**, **Д.В.Вифатнюк** (СПКТБ "Енергомашпроект", Київ), **А.С.Квасневський** (Інститут газу НАН України, Київ)

#### Моделювання тепломасообміну та хімічного реагування газодисперсного потоку пилевидних частинок вугілля у високотемпературному газифікаторі

Побудовано модель висхідного руху, тепломасообміну та хімічного реагування полідисперсного ансамблю частинок з урахуванням променевого і конвективного теплообміну між газом, частинками і шлаком, гетерогенних та гомогенних реакцій, міжфазної взаємодії. Особливістю цієї моделі є представлення легких формулою кисневмісної сполуки  $CH_{2,404}O_{0,522}$ , яка при високошвидкісному нагріванні розпадається на компоненти  $CO$ ,  $C_7H_8$  та  $H_2$ , після чого  $C_7H_8$  і  $H_2$  взаємодіють між собою, утворюючи  $C_6H_6$  і  $CH_4$ . Знайдено оптимальні значення  $B_{O_2}/B_{BY} = 0,785$  та  $B_{H_2O}/B_{BY} = 0,052$ , що забезпечують склад синтетичного газу з високим вмістом горючих – 93,2%, низькою концентрацією баласту – 2,8%, ступенем конверсії вуглецю 99,9 % і калорійністю 11,17 МДж/нм<sup>3</sup>. Бібл. 16, рис. 6.

**Ключові слова:** парокиснева газифікація, реактор, вугілля, піроліз, модель, синтетичний газ, частинка.

**Rokhman B.B.**, Doctor of Technical Sciences (Coal Energy Technology Institute NAS of Ukraine, Kyiv); **Vyfatniuk V.G.**, Chief designer (SPKTB "Energomashproekt", Kyiv); **Vyfatniuk, D.V.**, design project leader (SPKTB "Energomashproekt" Ltd, Kyiv); **Kvasnevskiy A.S.**, engineer of 1 category (Gas Institute NAS of Ukraine, Kyiv )

#### Modelling heat-and-mass transfer process and chemical reaction of gas-dispersed flow of the pulverized coal particles in high-temperature gasifier

A model of an upward movement, heat and mass transfer and chemical reaction of polydisperse ensemble of particles accounting for radiant and convective heat transfer between the

gas and slag particles, heterogeneous and homogeneous reactions, interfacial interaction was constructed. A special feature of this model is a representation of the volatiles by oxygenated compound formula  $CH_{2,404}O_{0,522}$ , which under high heating breaks down into components of  $CO$ ,  $C_7H_8$  and  $H_2$ , and then  $C_7H_8$  and  $H_2$  interact with each other to form  $C_6H_6$  and  $CH_4$ . The optimum ratio  $B_{O_2}/B_{BY} = 0,785$  and  $B_{H_2O}/B_{BY} = 0,052$  were found providing synthesis gas composition with a high content of combustible components – 93,2%, a low concentration of ballast – 2,8%, the degree of carbon conversion – 99,9% and calorific value – 11,17 MJ/Nm<sup>3</sup>. References 16, figures 6.

**Keywords:** steam-oxygen gasification, reactor, coal, pyrolysis, model, syngas, particle.

#### SYNOPSIS

A way to reduce consumption of expensive imported natural gas in the production of chemical products (ammonia, methanol, and other) is the use of synthesis gas, which can be obtained by steam-oxygen gasification of Alexandria dry lignite dust in a high-temperature flow of 4.2 Мpa pressure. For the construction of such devices at conceptual and technical design stages we constructed a model of the working process in the gasifier, by means of which detailed information about the geometrical, aerodynamic, thermal, chemical and physical parameters was obtained: 1) the optimum ratio  $B_{O_2}/B_{BY} = 0,785$  and  $B_{H_2O}/B_{BY} = 0,052$  were found providing synthesis gas composition with a high content of combustible components – 93,2%, a low concentration of ballast – 2,8%, the degree of carbon conversion – 99,9% and calorific value – 11,17 MJ/Nm<sup>3</sup>; 2) as the liquid slag temperature exceeds the liquidity of ash, shotcrete is made as a double-layer (the first layer – silicon carbide mass, the second – stabilized zirconium oxide) across the height of the reactor; 3) The main sources of radiation in the maximum temperature zone are gas – 1595 kJ/(s·m<sup>2</sup>) and carbon – 1161 kJ/(s·m<sup>2</sup>).

Стаття надійшла до редакції 15.06.16

Остаточна версія 26.07.16