

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЖИМОВ РАБОТЫ СТУПЕНЧАТОГО ПОТОЧНОГО УГОЛЬНОГО ГАЗОГЕНЕРАТОРА

Донской И.Г., Шаманский В.А., Козлов Н.А., Свищев Д.А.

ФГБУН «Институт систем энергетики имени Л.А. Мелентьева СО РАН»,  
г. Иркутск, Россия

*Разработана модель процесса ступенчатой газификации пылеугольного топлива. Математическая модель включает диффузионно-кинетические уравнения и уравнения баланса теплоты в пылевом потоке в одномерном приближении. Рассчитаны теоретические эпюры температуры и состава газа в реакционной зоне газогенератора.*

*Ключевые слова: газификация угольной пыли в потоке, ступенчатая газификация, математическое моделирование.*

*Staged pulverized coal gasification process model is developed. Mathematical model includes diffusional-kinetic equations and heat flow balance equations for one-dimensional dust flow. Theoretical temperature and gas composition curves are calculated using this model.*

*Keywords: entrained flow gasification, staged gasification process, mathematical modeling.*

### Введение

Технологии газификации твердых топлив широко применяются для производства горючих и технологических газов, которые могут быть использованы для получения энергии (тепловой и электрической) или химической продукции (в том числе металлургической). Известны различные способы совмещения энергетического и технологического производств в рамках одной установки. Однако предварительная оценка эффективности газифицирующих установок невозможна без разработки математических моделей, которые позволили бы на основе известных свойств топлива и дутья предсказать состав продукт-газа и влияние внешних параметров на эффективность процесса газификации.

Настоящая работа посвящена разработке модели ступенчатого пылеугольного газогенератора, аналогичного процессу, разработанному Mitsubishi Heavy Industries (MHI). Схема процесса представлена на рис. 1. Такая организация потоков позволяет получить калорийный газ и более полно использовать теплоту сгорания угля на стадии аллотермической газификации.

Реактор можно разделить на две зоны: в первой происходит практически полное сжигание топлива, подаваемого на первую стадию. За счет достижения высоких температур реализуется жидкое шлакоудаление. Во второй зоне реактора в раскаленные продукты сгорания подается вторичное топливо, которое газифицируется за счет теплоты сгорания первичного. При этом возможна также подача вторичного дутья. Полученный на второй стадии недожог возвращается после циклонной очистки генераторного газа на первую стадию.

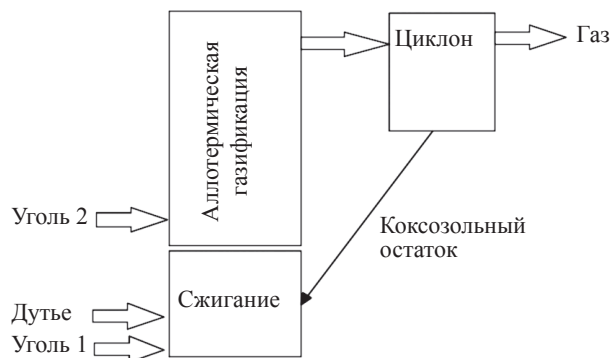


Рис. 1. Схема процесса МНГ

В литературе можно найти математические модели ступенчатых поточных процессов, в том числе в приложении к схеме МНГ, созданные на основе CFD-кодов [1–4]. В настоящей работе модель строится на основе более простых исходных положений (в частности, процесс считается пространственно одномерным). Такое упрощение не позволяет оценивать влияние некоторых гидродинамических эффектов на работу газогенератора, однако существенно упрощает вычисления и позволяет проанализировать влияние различных параметров в обозримое время.

#### Структура модели

В настоящей работе принимаются следующие предположения о протекании процесса газификации угольной частицы:

- скорость сушки лимитируется внешним массообменом с окружающим воздухом;
- скорость пиролиза пропорциональна содержанию летучих в частице и зависит от температуры по аррениусовскому закону;
- скорость газификации определяется из классического уравнения диффузионно-кинетической теории горения углерода.

Уравнение теплового баланса для угольной частицы записывается следующим образом:

$$c_p m \frac{dT}{dt} = \varepsilon \sigma S (T_w^4 - T^4) + \alpha S (T_g - T) - Q_w + Q_r.$$

Здесь  $c_p$  – удельная теплоемкость топлива, Дж/кг/К;  $m$  – масса частицы, кг;  $T$  – температура частицы, К;  $\varepsilon$  – степень черноты частицы;  $\sigma$  – постоянная Стефана–Больцмана, Вт/м<sup>2</sup>/К<sup>4</sup>;  $S$  – площадь поверхности частицы, м<sup>2</sup>;  $T_w$  – температура окружающей среды, К;  $\alpha$  – коэффициент конвективного теплопереноса, Вт/м<sup>2</sup>/К;  $Q_w$  – теплота испарения влаги, Вт;  $Q_r$  – теплота химических превращений, Вт.

Скорость сушки вычисляется по формуле:

$$j_w = \beta S (C_{H_2O}^{eq} - C_{H_2O}),$$

где  $j_w$  – поток влаги, кг/с;  $\beta$  – коэффициент массообмена, м/с;  $C_{H_2O}$  – концентрация водяных паров, кг/м<sup>3</sup>.

Коэффициент конвективного тепло- и массообмена для частицы в потоке рассчитывается по формуле Сокольского:

$$Nu = Sh = 2 + 0,16Re^{2/3}.$$

Здесь  $Nu$  – число Нуссельта,  $Sh$  – число Шервуда,  $Re$  – число Рейнольдса.

Скорость пиролиза описывается кинетическим уравнением первого порядка:

$$\frac{dm_V}{dt} = -A_{pyr} \exp\left(-\frac{E_{pyr}}{RT}\right) m_V.$$

Здесь  $m_V$  – масса летучих в частице, кг;  $A_{pyr}$  – предэкспоненциальный коэффициент, 1/с;  $E_{pyr}$  – энергия активации стадии пиролиза, Дж/моль;  $R$  – универсальная газовая постоянная, Дж/моль/К. Летучие вещества в модели представляются механической смесью химических элементов, которые после выхода из частицы топлива распределяются по молекулярным формам по условиям химического равновесия.

Скорость реагирования топлива с газообразными окислителями записывается следующим образом:

$$\frac{dm_C}{dt} = -k_{eff} S C_{ox},$$

где  $m_C$  – масса топлива, кг;  $k_{eff}$  – эффективная константа скорости гетерогенной реакции, м/с;  $S$  – площадь поверхности топлива, м<sup>2</sup>;  $C_{ox}$  – концентрация окислителя, кг/м<sup>3</sup>.

Эффективная константа скорости выражается через кинетические и массообменные коэффициенты (в предположении, что кинетический порядок реакции по окислителю равен 1) следующим образом:

$$k_{eff} = \frac{k_R k_D}{k_R + k_D}.$$

Здесь  $k_R$  – кинетическая константа скорости гетерогенной реакции, м/с;  $k_D$  – коэффициент массообмена частицы с потоком, м/с.

Кинетическая константа скорости гетерогенной реакции зависит от температуры по экспоненциальному закону:

$$k_R = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right),$$

где  $A$  – предэкспоненциальный коэффициент, м/с;  $E$  – энергия активации, Дж/моль.

Химическая кинетика реакций в газовой фазе не рассматривается: полагается, что выходящие в газовую фазу вещества переходят в состояние равновесия. Таким образом, химические превращения описываются с помощью термодинамической модели с макрокинетическими ограничениями на скорость гетерогенных превращений. Такой подход применим для высокотемпературных процессов, в которых скорость газозфазных процессов достаточно высока по сравнению со скоростью гетерофазных.

Для потоков газа и топлива в каждом сечении составляются тепловые балансы. Схему тепловых потоков можно представить следующим образом. Это одномерная по пространственным координатам схема, в которой рассматриваются тепловые потоки между топливом, газом и стенкой. Эти потоки включают кондуктивный (в т.ч. за счет турбулентного переноса), конвективный и лучистый теплообмен. В стационарном состоянии сумма потоков в каждой вершине должна равняться нулю. Таким образом, для расчета режимов работы газогенератора необходимо составить и решить систему уравнений баланса теплоты в каждой вершине графа [5].

Поскольку процессы переноса и химические превращения тесно связаны, необходимо совместное решение уравнений диффузионной кинетики и теплопереноса. В настоящей работе эти уравнения решаются по отдельности на разных стадиях одной итеративной процедуры. Предлагается следующий алгоритм:

- расчет химических превращений топливных частиц в потоке дутья;
- расчет переноса теплоты, выделившейся в результате химических превращений.

После завершения этих стадий расчет повторяется: химические превращения рассчитываются при уточненном температурном профиле, который затем корректируется с учетом химических превращений.

#### Верификация модели

Для верификации модели были использованы экспериментальные данные, полученные японскими исследователями на полупромышленной установке (производительность по углю 2 т/ч) [3]. Был выбран первый из описанных в статье режимов (все режимы, однако, были довольно близки, и различия между ними скорее обусловлены стехиометрическими факторами: расчет показывает, что химические превращения происходят в реакторе довольно быстро). Сравнение температурных профилей приведено на рис. 2.

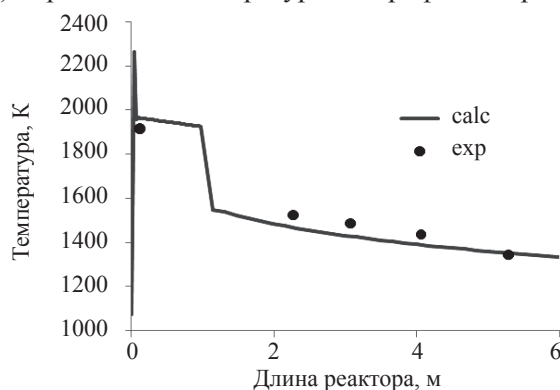


Рис. 2. Профиль температуры газа в реакторе (сплошная линия – расчет, точки – эксперимент [3])

#### Сравнение состава генераторного газа из эксперимента и из расчета

Содержание компонентов, об. %	Эксперимент [3]	Расчет
H <sub>2</sub>	7,33	7,35
CO	20,17	20,65
CO <sub>2</sub>	6,33	4,24
H <sub>2</sub> O	2	6,2

Видно удовлетворительное совпадение измеренных и рассчитанных температурных профилей. Состав газа (см. таблицу) также достаточно хорошо воспроизводится моделью. Это связано, как уже указывалось, с достаточно быстрым протеканием химических реакций и близостью расчетного и экспериментального режимов к равновесию. Имеются, однако, существенные отличия в величине твердого остатка, рециркулирующего в схеме. Для решения этого вопроса необходимы, в первую очередь, данные по полному материальному балансу установки. Такие данные, к сожалению, на настоящий момент недоступны.

#### Заключение

В работе развита модель физико-химических процессов, протекающих в реакционной зоне ступенчатого поточного газогенератора. В модели учтены основные факторы, влияющие на скорости процессов переноса и гетерогенных химических реакций. Проведенные расчеты показывают согласие с известными экспериментальными данными.

*Исследование выполнено в Уральском федеральном университете за счет гранта Российского научного фонда (проект № 14-19-00524).*

#### Список использованных источников

1. Hanjalic K., Sijeric K. Application of computer simulation in a design study of a new concept of pulverized coal gasification. Part I. Rationale of the concept and model of hydrodynamics and heat transfer in the reactor // *Combustion Science and Technology*. – 1994. – V. 97. – P. 331–350.
2. Sijeric M., Hanjalic K. Application of computer simulation in a design study of a new concept of pulverized coal gasification. Part II. Model of coal reactions and discussion of results // *Combustion Science and Technology*. – 1994. – V. 97. – P. 351–375.
3. Watanabe H., Otake M. Numerical simulation of coal gasification in entrained flow coal gasifier // *Fuel*. – 2006. – V. 85. – P. 1935–1943.
4. Modeling and simulation of coal gasification on an entrained flow coal gasifier with a recycled CO<sub>2</sub> injection / H. Watanabe, K. Tanno, H. Umetsu, S. Umemoto // *Fuel*. – 2015. – V. 142. – P. 250–259.
5. Донской И.Г., Шаманский В.А. Применение моделей последовательных равновесных состояний для описания газификации твердых топлив // XXXI Сибирский теплофизический семинар (17–19 ноября 2014 г., г. Новосибирск). Доклады. – Новосибирск: ИТ СО РАН, 2014. – С. 196–199.