

УДК 662.764; 66.011

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЕВОГО ПРОТИВОТОЧНОГО ГАЗИФИКАТОРА ДЛЯ КОНВЕРСИИ УГЛЕЙ И ШЛАМОВ В ПОТОКЕ ПЕРЕГРЕТОГО ПАРА**

*Алексеев М.В., Богомолов А.Р., Прибатурин Н.А., Шевырев С.А.,  
Сорокин А.Л., Кагакин Е.И.*

*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск  
Кузбасский государственный технический университет им. Т.Ф. Горбачева*

В настоящее время в связи с необходимостью развития ресурсосберегающих технологий возникла проблема переработки низкосортных углеродсодержащих материалов, таких как угольные отходы и шламы. Одним из способов переработки таких материалов, имеющих высокую влажность и зольность, является их газификация перегретым водяным паром [1, 2]. Создание промышленной технологии переработки этих материалов требует большого объема экспериментальных исследований, который может быть значительно сокращен при сочетании модельных экспериментальных исследований с численным моделированием. Поэтому актуальной является задача численного моделирования процессов тепло- и массообмена при конверсии органических веществ в газификаторе.

Объектом исследования является модель газификатора, представляющего собой вертикальный цилиндрический теплоизолированный аппарат, в который сверху подается дисперсный углеродсодержащий материал. Перемещаясь вниз под действием собственного веса и принудительном выводе зольного остатка из нижней части газификатора, материал образует пористую среду, через которую противотоком движется поток перегретого пара, подаваемого снизу аппарата. Предварительные оценки интенсивности межфазного теплообмена показывают, что высота корпуса должна быть значительно больше его диаметра, поэтому моделирование можно проводить в одномерном приближении, пренебрегая неоднородностью основных параметров (скорости, температуры) по сечению корпуса.

При разработке модели в основу была положена модель автотермической слоевой газификации, разработанная в [3]. При автотермической паровоздушной газификации протекание эндотермической реакции взаимодействия углерода с  $H_2O$  обеспечивается сгоранием части углерода с кислородом. При паровой газификации, в отличие от автотермической, кислород отсутствует, и тепло, обеспечивающее протекание указанной реакции, обеспечивается перегретым паром. Это позволяет упростить модель [3].

В рамках модели предполагается, что дисперсная фаза состоит из сферических частиц одинакового диаметра с жестким зольным скелетом, поры которого равномерно заполнены углеродом и летучими веществами. Вещество частиц состоит из углерода  $C$ , влаги  $W$ , летучих веществ  $V$  и инертного зольного остатка  $A$ . Система пар-угольные частицы представляет собой гетерогенную смесь, в объеме которой пар имеет долю  $\varepsilon$  (порозность). Дисперсная фаза

движется под собственным весом сверху вниз со скоростью  $w$  (скорость скольжения), в противоток происходит инфильтрация газовой фазы со скоростью  $u$  (рис. 1). Моделирование процессов, протекающих в твердой фазе – пиролиза, гетерогенного реагирования, а также описание теплопроводности твердой фазы проводится в рамках континуального подхода [4]. Температура твердой фазы в фиксированной точке – это осредненная по сечению аппарата температура поверхности частиц. Наличием температурных и концентрационных градиентов в частице пренебрегаем. Гидродинамические (сопротивление фильтрующемуся потоку газа) и теплофизические (теплопроводность, теплоемкость) свойства твердой фазы равномерно распределены по высоте слоя и не изменяются в радиальном направлении. Газовая фаза включает перегретый пар, газообразные продукты пиролиза и продукты гетерогенного и гомогенного химического реагирования, представляющие собой однородную смесь идеальных газов, подчиняющихся уравнению состояния Клапейрона-Менделеева. Давление принято постоянным.

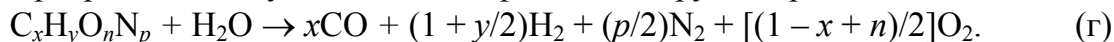
Процесс термического разложения угольных частиц рассматривается как переход влаги и летучих компонентов из твердой фазы в газовую. Углерод коксового остатка вступает во взаимодействие с перегретым паром в эндотермической реакции:



Наряду с этой реакцией в объеме газа протекают эндотермическая реакция окисления оксида углерода(II) водяным паром и экзотермическая реакция окисления водорода:



Превращение летучих в газовой фазе моделируется реакцией



Здесь  $x, y, p, n$  – молярные концентрации элементов в летучих. Выход влаги и летучих описываются уравнениями

$$\frac{D\bar{m}_w}{Dt} = -r_v\bar{m}_w \quad \frac{D\bar{m}_v}{Dt} = -r_v\bar{m}_v$$

где  $r_v = 10^5 \exp(15000/T) \cdot \bar{m}_w, \bar{m}_v$  – массовая концентрация влаги и летучих в твердой фазе [5, 6].

Гетерогенное реагирование коксового остатка протекает в диффузионно-кинетическом режиме [7]. Расходование углерода описывается моделью «сжимающегося углеродного ядра». Изменение концентрации углерода в твердой фазе происходит с уменьшением радиуса

углеродного ядра  $\rho_c = \left(\frac{d}{d_0}\right)^3 \rho_c^0$ , где  $\rho_c^0, \rho_c$  – начальная и текущая концентрации углерода в твердой фазе,  $d_0, d$  – начальный

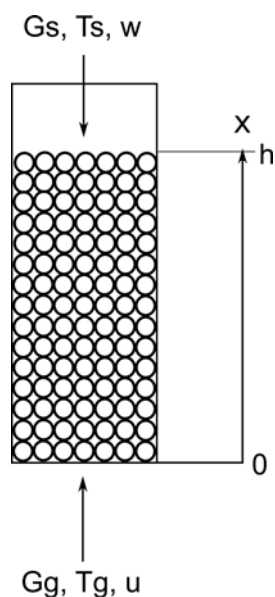


Рис. 1. Схема расчета.

начальная и текущая концентрации углерода в твердой фазе,  $d_0, d$  – начальный

и текущий диаметр частицы. Скорость гетерогенного реагирования коксового остатка  $r_{H_2O} = S_d k'_{H_2O} (\rho m_{H_2O})$ , где  $\rho$  – плотность газовой смеси,  $m_{H_2O}$  – массовая концентрация  $H_2O$  в смеси,  $S_d = \left(\frac{d}{d_0}\right)^2 S$  – удельная площадь реагирующей поверхности,  $S = \frac{\varepsilon}{\xi d_0}$  – удельная контурная поверхность частиц,  $\varepsilon$  – порозность,  $\xi = 0.1$  – эмпирический коэффициент. Величина

$$\frac{1}{k'_{H_2O}} = \frac{1}{k_{H_2O}} + \frac{d}{2D'} \left(1 - \frac{d}{d_0}\right) + \frac{1}{\alpha_D} \left(\frac{d}{d_0}\right)^2$$

выражает общее сопротивление реагированию. Учитывается диффузионное сопротивление погранслоя частицы  $\frac{1}{\alpha_D} \left(\frac{d}{d_0}\right)^2$ , зольного скелета  $\frac{d}{2D'} \left(1 - \frac{d}{d_0}\right)$  и химическое сопротивление  $\frac{1}{k_{H_2O}}$ . Здесь  $\alpha_D = \frac{NuD}{d_0}$  – коэффициент массообмена частиц с газом,  $Nu = \frac{0.3}{Sd_0} Re^{0.8} \varepsilon^{0.75}$  – критерий Нуссельта [5],  $Re = \frac{ud_0}{\nu_g}$  – критерий

Рейнольдса,  $u$  – скорость потока смеси,  $\nu_g = \frac{1}{\rho} 1.58 \cdot 10^{-6} \left(\frac{T}{273}\right)^{0.75}$  – вязкость смеси [10],  $D = 0.16 \cdot 10^{-4} \left(\frac{T}{273}\right)^{1.9}$  – коэффициент диффузии [11],  $D' = \varepsilon_c D$  – коэффициент диффузии в пористом скелете частиц,  $\varepsilon_c = 0.4$  – пористость частиц,  $T = (T_g + T_s)/2$  – полусумма температур смеси и частиц,  $k_{H_2O} = 2.06 \cdot 10^5 \exp(12740/T)$  – химическое сопротивление реагированию.

Скорость протекающей в газовой фазе реакции (г) определяется уравнением  $\frac{Dm_V}{Dt} = -r_{hV} m_V$ , где  $r_{hV} = -10^{5.41} V \exp(25430/T)$ ,  $m_V$  – массовая концентрация летучих в газовой фазе.

Система уравнений модели включает уравнения переноса компонент газовой фазы:

$$\frac{dg_{O_2}}{dx} = \frac{1+x-n}{2} r_{hV} m_V \frac{\mu_{O_2}}{\mu_V} \quad (1)$$

$$\frac{dg_{H_2O}}{dx} = -r_{H_2O} + (1-\varepsilon) r_V m_W - r_{hV} m_V \frac{\mu_{H_2O}}{\mu_V} \quad (2)$$

$$\frac{dg_{CO}}{dx} = \frac{\mu_{CO}}{\mu_{H_2O}} r_{H_2O} + x r_{hV} m_V \frac{\mu_{CO}}{\mu_V} \quad (3)$$

$$\frac{dg_{H_2}}{dx} = \frac{\mu_{H_2}}{\mu_{H_2O}} r_{H_2O} + \left(1 + \frac{y}{2}\right) r_{hV} m_V \frac{\mu_{H_2}}{\mu_V} \quad (4)$$

$$\frac{dg_V}{dx} = (1 - \varepsilon)r_V \bar{m}_V - r_{hV} m_V \quad (5)$$

$$\frac{dg_g}{dx} = (1 - \varepsilon)(r_V \bar{m}_V + r_W \bar{m}_W + r_{H_2O} \bar{m}_C) \quad (6)$$

уравнение энергии газовой фазы:

$$\frac{d(g_g C_{pg} T_g)}{dx} = -\alpha(T_g - T_s) + q_g \quad (7)$$

уравнения переноса компонент твердой фазы:

$$\frac{d\bar{g}_W}{dx} = -r_W \bar{m}_W \quad (8)$$

$$\frac{d\bar{g}_V}{dx} = -r_V \bar{m}_V \quad (9)$$

$$\frac{d\bar{g}_C}{dx} = -r_{H_2O} \bar{m}_C \quad (10)$$

уравнение энергии твердой фазы:

$$\frac{d((\bar{g}_C + \bar{g}_V + \bar{g}_W + \bar{g}_A)C_s T_s)}{dx} = \alpha(T_g - T_s) + q_s \quad (11)$$

В этих уравнениях  $g_i = \rho u m_i$ ,  $\mu_i$  – плотности массовых потоков и молекулярные веса компонент газовой фазы соответственно,  $u$  – скорость потока газовой фазы,  $m_i$  – массовая концентрация  $i$ -го компонента газовой фазы,  $C_{pg} = \sum_i m_i C_{pi}$  – теплоемкость газовой фазы,  $C_{pi}$  – теплоемкость компонент газовой фазы,  $\bar{g}_i = \rho_i v$  – плотность массовых потоков компонент твердой фазы,  $v$  – скорость потока твердой фазы,  $\bar{m}_i$  – массовая концентрация  $i$ -го компонента твердой фазы,  $C_s$  – теплоемкость твердой фазы,  $\alpha = \frac{Nu \lambda_g}{d_0}$  – коэффициент конвективного теплообмена частиц с газом,  $\lambda_g = 2.52 \cdot 10^{-2} \left( \frac{T}{273} \right)^{0.75}$  [9].

В уравнениях энергии источники члены  $q_g$  и  $q_s$  определяются формулами:

$$q_g = (1 - \varepsilon) C_{pg} (T_g - T_s) (r_V \bar{m}_V + r_W \bar{m}_W + r_{H_2O} \bar{m}_C) + L_{hV} r_{hV} m_V$$

$$q_s = L r_W \bar{m}_W + L_V r_V \bar{m}_V + L_C r_{H_2O} \bar{m}_C,$$

где  $L = 2260$  кДж/кг – теплота парообразования,  $L_V = 3101$  кДж/кг – энтальпия образования летучих,  $L_C = 10990$  кДж/кг – энтальпия реакции водяного пара с углеродом,  $L_{hV} = -65.36$  кДж/кг энтальпия реакции летучих с водяным паром. Плотность газовой фазы рассчитывалась по уравнению состояния идеального

газа  $\rho = \frac{P}{RT} \mu_g$ ,  $\mu_g = \left[ \sum_i \frac{m_i}{\mu_i} \right]^{-1}$  – средняя молярная масса смеси газов.

Граничные условия для уравнений газовой фазы (1–7) задавались при  $x=0$ . Плотность массового расхода смеси и пара вычислялись по заданному расходу

пара и площади поперечного сечения газификатора  $g_g = g_{H_2O} = G_V / S$ , массовые расходы остальных компонент смеси  $g_{CO} = 0$ ,  $g_{H_2} = 0$ ,  $g_{O_2} = 0$ ,  $g_V = 0$ . Температура смеси приравнивалась температуре перегретого пара  $T_g = T_V$ . Для уравнений твердой фазы (8-11) граничные условия задавались при  $x = h$ . Плотность массовых расходов влаги, летучих, углерода и золы вычислялись по заданному углю, его составу и площади поперечного сечения газификатора  $\bar{g}_W = WG_T / S$ ,  $\bar{g}_V = VG_T / S$ ,  $\bar{g}_C = CG_T / S$ ,  $\bar{g}_A = AG_T / S$ , где  $W, V, C, A$  - массовые доли влаги, летучих, углерода и золы в угле. Температура твердой фазы приравнивалась температуре подаваемого угля  $T_s = T_T$ .

Система уравнений (1–11) с принятыми граничными условиями и замыкающими соотношениями образует двухточечную краевую задачу для системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Поставленная краевая задача решалась численно.

В работе проведено исследование процесса газификации органического сырья в газификаторе с тепловой мощностью потока пара 50 кВт. При данной мощности и температуре пара  $T_g = 1000$  °C площадь сечения газификатора составляет  $S = 4,4 \cdot 10^{-3} \text{ м}^2$ , радиус корпуса  $R = 0,0375$  м. Расход пара, поступающий в газификатор при данной мощности, составляет  $Gg = 0,0189$  кг/с. В качестве твердого топлива для газификации был выбран шлам угля ЦОФ «Березовская» со следующими параметрами: массовая доля влаги  $W^r = 35$  %, массовая доля углерода  $C^r = 42,6$  %, массовая доля водорода  $H^r = 2,9$  %, массовая доля кислорода  $O^r = 13,9$  %; массовая доля азота  $N^r = 0,4$  %; массовая доля летучих  $V^r = 28,8$  %. Расчетные молярные коэффициенты для летучих  $C_xH_yO_nN_p$  составляют  $x = 2,0374$ ,  $y = 6,0695$ ,  $n = 1,8328$ ,  $p = 0,0602$ , при этом молярная масса летучих составляет 0,0608 кг/моль. Диаметр зерна твердой фазы составляет  $d = 0,004$  м. Высота газификатора составляла  $H = 1$  м. Начальная температура твердой фазы составляла  $T_s = 20$  °C. Расход твердой фазы выбирался из отношения расходов  $Kg = 1; 0,5; 0,25; 0,16-0,176$ , где  $Kg = Gs / Gg$  — отношение начального расхода твердой фазы к расходу пара.

На рис. 2 показан профиль температуры газовой фазы  $Tg$  (рис. 2а) и профиль температуры твердой фазы  $Ts$  (рис. 2б) по длине рабочего участка. Температура газовой фазы уменьшается с 1000 °C на входе в газификатор до температуры на выходе 500-250 °C, в зависимости от расхода твердой фазы. Подобным образом изменяется профиль температуры твердой фазы  $Ts$ . При движении твердой фазы происходит повышение температуры  $Ts$  от координаты  $x = h$  к координате  $x = 0$ . На выходе рабочего участка температура твердой фазы изменяется в пределах от 700 до 900 °C. При уменьшении расхода твердой фазы происходит повышение средней температуры газовой фазы и температуры твердой фазы. На рис. 3 показано изменение расхода газовой  $Gg$  и твердой фазы  $Gs$  соответственно. Можно заметить, что уменьшение расхода фазы  $Gs$  не всегда приводит к снижению расхода газовой фазы  $Gg$ . Например при понижении относительного расхода твердой фазы с  $Kg = 1$  до  $Kg = 0,5$  расход газовой фазы увеличивается. Для объяснения этого факта рассмотрим данные относительных массовых концентраций летучих  $Vs$  и углерода  $Cs$  в твердой фазе (рис. 4). Результаты расчетов показали, что профиль относительной массовой

концентрации влаги  $Ws$  в твердой фазе изменяется подобно профилю массовой концентрации летучих  $Vs$ . Данный факт объясняется тем, что в математической модели скорость выхода влаги и летучих определяются одинаковой зависимостью от температуры твердой фазы. Поэтому, в данной модели зона сушки и зона карбонизации совпадают. Полный выход влаги  $Ws$  и летучих  $Vs$  (рис. 4а.) на всей высоте газификатора происходит при отношении расходов около  $Kg = 0,25$ . При последующем уменьшении относительного расхода твердой фазы зона сушки и зона выхода летучих перемещаются в нижнюю часть газификатора. Рассмотрим профиль концентрации углерода  $Cs$  на рис. 4б. Существенное изменение профиля концентрации возникает только при уменьшении расходного значения  $Kg \leq 0.25$ . Данный факт объясняется низкой температурой для конверсии углерода из-за выхода влаги и летучих. Предельный расход  $Kg=0,16$  получен при уменьшении массовой концентрации углерода  $Cs$  до 10%. На графиках на рис. 5а и 5б представлены значения профилей массовых концентраций водорода  $m_{H_2}$ , окиси углерода  $m_{CO}$  соответственно.

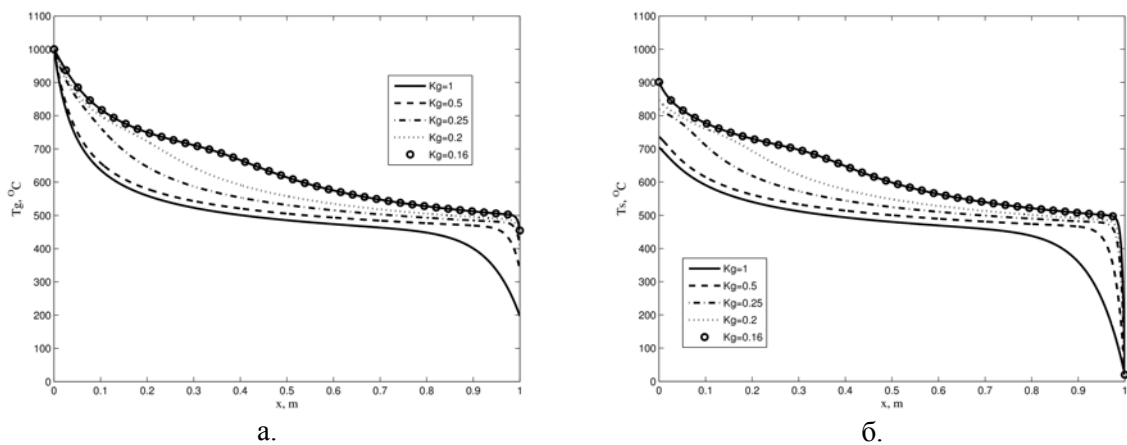


Рис. 2. Профиль температуры газовой фазы –  $Tg$  (а) и профиль температуры твердой фазы –  $Ts$  (б) по высоте рабочего участка при различном значении  $Kg$ , диаметр зерна твердой фазы  $d = 0,004$  м.

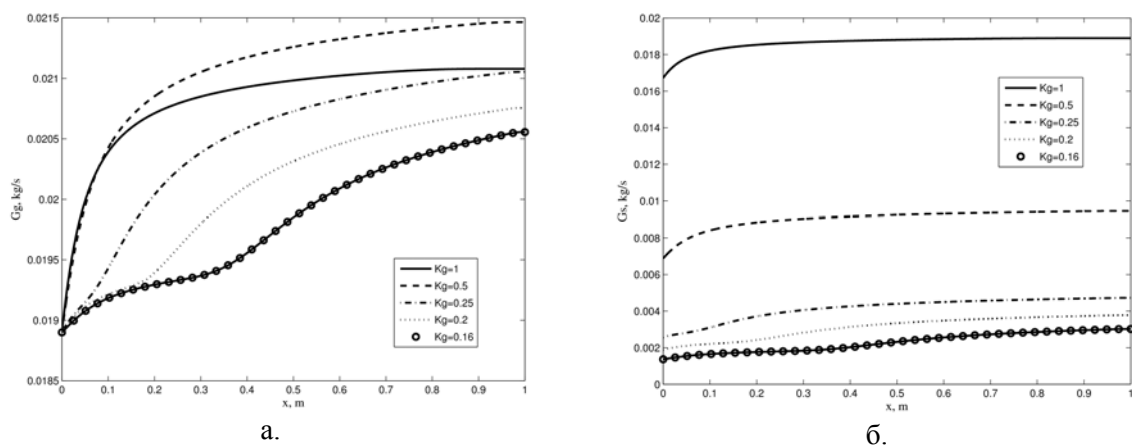


Рис. 3. Профиль массового расхода газовой фазы –  $Gg$  (а) и профиль массового расхода твердой фазы –  $Gs$  (б) по высоте рабочего участка при различном значении  $Kg$ , диаметр зерна твердой фазы  $d = 0,004$  м.

При рассмотрении профилей массовой концентрации водорода  $m_{H_2}$  и окиси углерода  $m_{CO}$  в газовой фазе была найдена их корреляция с изменением массовой концентрации углерода в твердой фазе. Это указывает на то, что основным фактором в изменении массовой концентрации водорода  $m_{H_2}$  и окиси углерода  $m_{CO}$  является процесс паровой конверсии углерода.

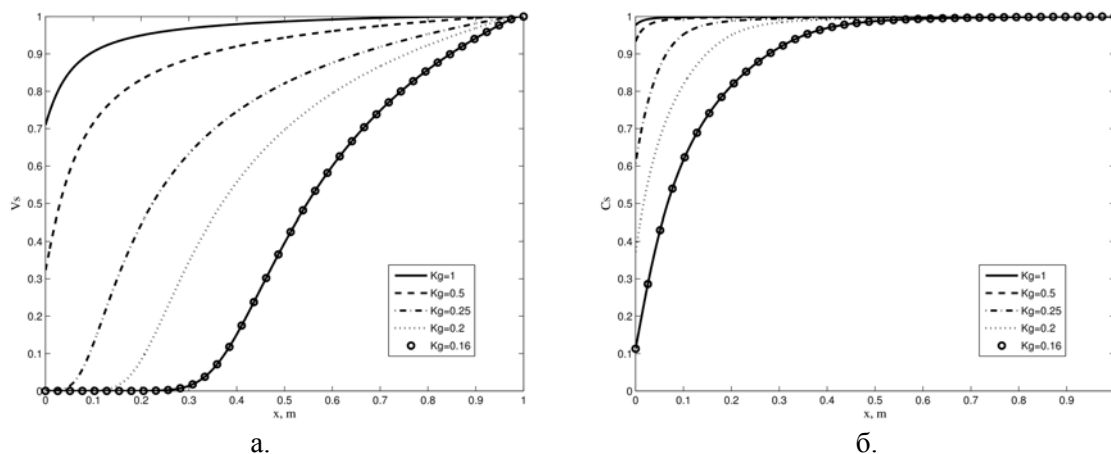


Рис. 4. Профиль относительной массовой концентрации летучих в твердой фазе –  $V_s$  (а) и профиль относительной массовой концентрации углерода в твердой фазе –  $C_s$  (б) по высоте рабочего участка при различном значении  $K_g$ , диаметр зерна твердой фазы  $d = 0,004$  м.

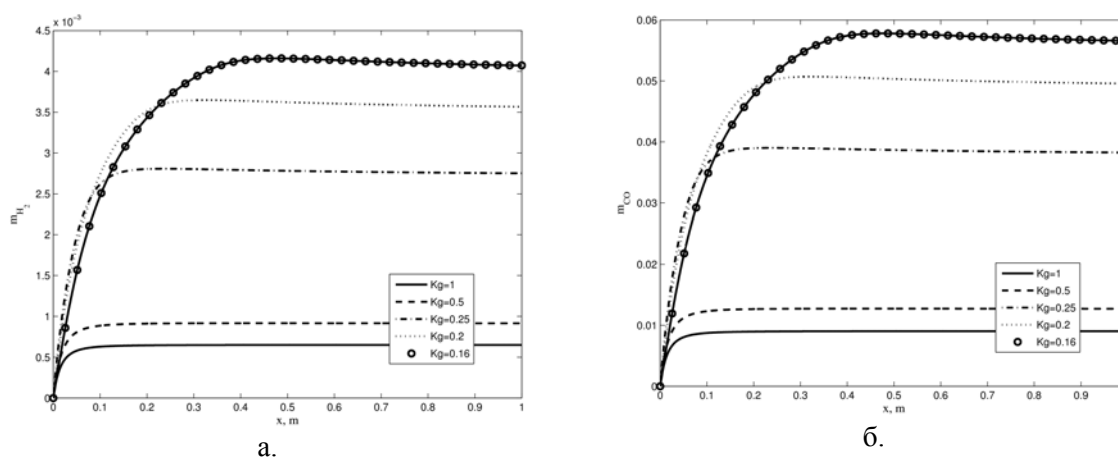


Рис. 5. Профиль массовой концентрации  $H_2$  в газовой фазе –  $m_{H_2}$  (а) и профиль массовой концентрации  $CO$  в газовой фазе –  $m_{CO}$  (б) по высоте рабочего участка при различном значении  $K_g$ , диаметр зерна твердой фазы  $d = 0,004$  м.

## Выводы

Анализ профилей массовой концентрации влаги и летучих в твердой фазе, полученных при численном моделировании, выявил совпадение зоны сушки и зоны карбонизации, что обусловлено свойствами описания процесса выхода летучих и влаги в математической модели. Основной вклад в увеличение массовой концентрации водорода и окиси углерода в газовой фазе вносит изменение массовой концентрации углерода в твердой фазе при паровой конверсии. При уменьшении расхода твердой фазы при неизменности начального

расхода газовой фазы зона конверсии углерода увеличивается, зона сушки и карбонизации уменьшается. Вклад процесса паровой конверсии летучих в образование водорода и окиси углерода в газовой фазе пренебрежимо мал.

В заключении можно отметить, что при постановке задачи была выбрана технологическая схема процесса конверсии углеродосодержащих материалов в виде одностадийного аппарата. Исследование характеристик данного типа аппарата в данной работе выявило, что реализация в одном аппарате процесса сушки, карбонизации и паровой конверсии является противоречивой задачей. Для улучшения характеристик паровой конверсии углеродосодержащих материалов представляется перспективным разработка двухстадийной технологии с разделением процессов сушки и карбонизации углеродосодержащих материалов и процесса паровой конверсии карбонизированного продукта, полученного в первой стадии. Реализация численного эксперимента для двухстадийной технологии является предметом дальнейшего исследования.

### Литература

1. Прибатурин, Н.А. Конверсия углеродсодержащих материалов в среде высокотемпературного водяного пара / Н.А. Прибатурин, А.Р. Богомолов, М.В. Алексеев, С.А. Шевырев // Вестн. Кузбасского гос. техн. ун-та. – 2010, № 4. – С. 89-93.
2. Прибатурин, Н.А. Изучение горения водород-кислородной смеси в потоке водяного пара низкой температуры / Н.А. Прибатурин, В.А. Федоров, М.В. Алексеев, А.Л. Сорокин // Тепловые процессы в технике. – 2012, №6. – С.
3. Гроо, А.А. Численное решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих тепло- и массообмен с химическими реакциями в слоевом газификаторе / А.А. Гроо, И.А. Кузоватов, С.Г. Степанов // Математические методы и моделирование. - Красноярск: КГТУ, 2004, вып. 33. - С. 71-78.
4. Нигматуллин, Р.И. Основы механики гетерогенных сред / Р.И. Нигматуллин. – М.: Наука, 1978. – 336 с.
5. Виленский, Т. В. Динамика горения пылевидного топлива / Т.В. Виленский, Д.М. Хзмалян. - М.: Энергия, 1977. – 248 с.
6. Волков, Э.П. Моделирование горения твердого топлива / Э.П. Волков, Л.И. Зайчик, В.А. Перушков. – М.: Наука, 1994. – 320 с.
7. Ворончихина, Т.С. Компьютерная модель нестационарных процессов при слоевой газификации угля / Т.С. Ворончихина, В.С. Славин, С.Р. Исламов // Сиб. физ.-техн. журнал. – 1993, No 3. – С. 85-89.
8. Pratt, P.T. CREK. A computer program for calculation of combustion reaction equilibrium and kinetics in laminar or turbulent flow / P.T. Pratt, J.J. Wormeck //Report WSU-ME-TEL-76-1. Washington State University – 1976.
9. Варгафтик, Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей / Н.Б. Варгафтик. - М.: ГИФМЛ, 1963. – 708 с.
10. Берд, Р. Процессы переноса / Р. Берд, В. Лайтфут, Е. Стюарт. – М.: Химия, 1974.– 688 с.
11. Бабий, В.И. Горение угольной пыли и расчет пылеугольного факела /В.И. Бабий, Ю.Ф. Куваев. - М.: Энергоатомиздат, 1986. – 208 с.