

Рохман Б.Б.¹, докт. техн. наук,

Клюс В.П.², канд. техн. наук, **Клюс С.В.²,** канд. техн. наук

¹ Інститут теплоенергетичних технологій НАН України, Київ

вул. Андріївська, 19, 04070 Київ, Україна, e-mail: brolene@yahoo.com

² Інститут відновлюваної енергетики НАН України, Київ

вул. Гната Хоткевича, 20а, 02094 Київ, Україна, e-mail: biomassa@ukr.net

Математичне моделювання та числове дослідження процесу газифікації фіксованого вуглецю біомаси у щільному шарі при атмосферному тиску.

Частина 1. Теоретичний опис конверсії коксозольних частинок у нерухомому шарі

На основі наведеної системи параболічних рівнянь, яка описує процес конверсії коксозольного залишку в пароповітряній суміші, збагачений киснем, побудовано нестационарну модель газифікації твердого палива в фіксованому шарі з урахуванням міжфазного конвективного теплообміну, радіаційно-кондуктивного тепlopереносу твердої фази, променевого та кондуктивного теплообміну шару зі стінкою реактора, гетерогенних та гомогенних хімічних реакцій, сил тяжіння та аеродинамічного опору. Запропонована модель дає можливість отримати детальну інформацію щодо геометричних, аеродинамічних, теплових та фізико-хімічних параметрів газифікації твердого палива в нерухомому шарі за різного тиску в будь-який момент часу. *Бібл. 7, рис. 1.*

Ключові слова: математичне моделювання, процес газифікації, біомаса, конверсія коксозольних частинок.

У запропонованій роботі розглядається пароповітряна газифікація пелет лігніну в нерухомому шарі при атмосферному тиску. Припускається, що усі леткі речовини виділяються в піролізі, який розміщено поза шаром, а в шарі відбувається термохімічна переробка коксозольного залишку.

У відповідності до змін, які зазнає паливо в процесі термохімічної переробки, нерухомий шар коксозольних частинок можна умовно поділити на три зони (рис. 1). Зона 2 примикає до колосникової решітки та формується з частинок золи та шлаку, які утворюються в результаті горіння та газифікації твердого палива, та призначена для захисту колосників від переґріву. Над шлаковою подушкою розміщується окиснювальна зона 3, котра містить дві області. У першій, де більшість кисню в дуже вузькому інтервалі шару інтенсивно витрачається на кон-

версію вуглецю та догоряння H_2 , температури газу та коксо-зольних частинок біомаси досягають максимального значення. У другій (окиснювально-відновлювальної області реагування) теплоголінання ендотермічних реакцій $\text{C} + \text{CO}_2 = 2 \text{ CO}$ та $\text{C} + \text{H}_2\text{O} = \text{CO} + \text{H}_2$ домінує над тепловиділенням екзотермічних реакцій $\text{C} + \text{O}_2 = \text{CO}_2$, $\text{C} + 0,5 \text{ O} = \text{CO}$, $\text{CO} + 0,5 \text{ O}_2 = \text{CO}_2$ та $\text{H}_2 + 0,5 \text{ O}_2 = \text{H}_2\text{O}$, внаслідок чого відбувається різке падіння температур фаз та концентрації O_2 . Відновлювальна зона 4 має більшу протяжність, ніж окиснювальна область, через малі швидкості гетерогенних відновлювальних реакцій, обумовлених відносно низькими рівнями температур дискретної фази та концентраціями газових реагентів H_2O та CO_2 .

Для конструктування газогенератора та теоретичного дослідження робочого процесу в ньому необхідно побудувати модель, яка дасть можли-

вість отримати детальну інформацію щодо геометричних, аеродинамічних, теплових

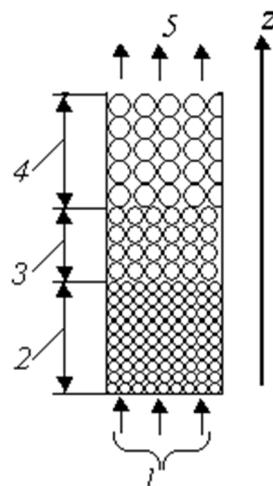


Рис. 1. Схема пароповітряної газифікації твердого палива в нерухомому шарі: 1 – гаряче повітря + пар; 2 – шлакова подушка; 3 – зона окиснення; 4 – зона відновлення; 5 – вихід синтетичного газу.

Fig. 1. Scheme of steam-air gasification of solid fuel in a fixed bed: 1 – hot air + steam; 2 – slag pad; 3 – oxidation zone; 4 – gasification zone; 5 – syngas outlet.

та фізико-хімічних реакцій, параметрів пароповітряної газифікації коксозольного залишку біомаси (лігніну) у фіксованому шарі.

Постановка задачі

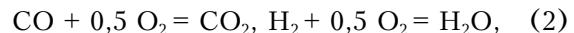
Припускається, що газова суміш у газогенераторі складається з кисню, діоксиду та оксиду вуглецю, азоту, водяної пари та водню, тверда

фаза представлена монодисперсними частинками сферичної форми, протікання гетерогенних реакцій горіння та газифікації на поверхні частинок призводить до зменшення їхнього розміру при незмінній щільності, порозність шару по вертикальній осі z не змінюється, газ між частинками шару рухається у режимі ідеального витіснення, стехіометрична схема реакцій в нерухомому шарі включає:

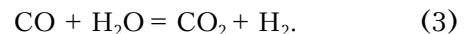
– чотири гетерогенні реакції:



– дві гомогенні окислювальні реакції:



– реакцію водяного зсуву:



Основні рівняння

Система диференційних рівнянь, що описує аеродинаміку, тепломасообмін та хімічне реагування коксозольних частинок біомаси в газифікаторі включає такі рівняння: нерозривності для кисню (4), діоксиду вуглецю (5), оксиду вуглецю (6), водяної пари (7), водню (8), збереження кількості руху (9) та збереження енергії газової фази (10), руху частинок (11) та теплового балансу частинок (12):

$$\frac{\partial C_{\text{O}_2}}{\partial \tau} + \frac{\partial (u_g C_{\text{O}_2})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{\text{O}_2 \rightarrow \text{cm}} \frac{\partial C_{\text{O}_2}}{\partial z} \right] - \frac{6(k_{\text{C+O}_2} + k_{\text{C+0.5O}_2})C_{\text{O}_2}^w(1-\varepsilon)}{\delta} - 0,5r_{\text{CO+O}_2} - 0,5r_{\text{H}_2+\text{O}_2}; \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{\text{CO}_2}}{\partial \tau} + \frac{\partial (u_g C_{\text{CO}_2})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{\text{CO}_2 \rightarrow \text{cm}} \frac{\partial C_{\text{CO}_2}}{\partial z} \right] + \frac{6(k_{\text{C+O}_2} C_{\text{O}_2}^w - k_{\text{C+CO}_2} C_{\text{CO}_2}^w)(1-\varepsilon)}{\delta} + \\ + r_{\text{CO+O}_2} + r_{\text{CO+H}_2\text{O}}; \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{\partial C_{\text{CO}}}{\partial \tau} + \frac{\partial (u_g C_{\text{CO}})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{\text{CO} \rightarrow \text{cm}} \frac{\partial C_{\text{CO}}}{\partial z} \right] + \\ + \frac{12 \left[k_{\text{C+0.5O}_2} C_{\text{O}_2}^w + k_{\text{C+CO}_2} C_{\text{CO}_2}^w + k_{\text{C+H}_2\text{O}} C_{\text{H}_2\text{O}}^w \right] (1 - \varepsilon)}{\delta} - r_{\text{CO+O}_2} - r_{\text{CO+H}_2\text{O}}; \quad (6)$$

$$\frac{\partial C_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial \tau} + \frac{\partial (u_g C_{\text{H}_2\text{O}})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{cm}} \frac{\partial C_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial z} \right] - \frac{6 k_{\text{C+H}_2\text{O}} C_{\text{H}_2\text{O}}^w (1 - \varepsilon)}{\delta} + \\ + r_{\text{H}_2+\text{O}_2} - r_{\text{CO+H}_2\text{O}}; \quad (7)$$

$$\frac{\partial C_{\text{H}_2}}{\partial \tau} + \frac{\partial (u_g C_{\text{H}_2})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{\text{H}_2 \rightarrow \text{cm}} \frac{\partial C_{\text{H}_2}}{\partial z} \right] + \frac{6 k_{\text{C+H}_2\text{O}} C_{\text{H}_2\text{O}}^w (1 - \varepsilon)}{\delta \delta} - r_{\text{H}_2+\text{O}_2} + r_{\text{CO+H}_2\text{O}}; \quad (8)$$

$$\frac{\partial (\rho_g u_g)}{\partial \tau} + \frac{\partial (\rho_g u_g^2)}{\partial z} = - \frac{\partial P_g}{\partial z} - g \rho_g + \frac{\partial}{\partial z} \left[\rho_g \eta_g \frac{\partial u_g}{\partial z} \right] - \\ - \frac{150 \eta_g \rho_g (1 - \varepsilon)^2 u_g}{\delta^2 \varepsilon^3} - \frac{1,75 \rho_g (1 - \varepsilon) u_g^2}{\delta \varepsilon^3}; \quad (9)$$

$$\frac{\partial (\rho_g c_g t_g)}{\partial \tau} + \frac{\partial (\rho_g u_g c_g t_g)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\lambda_{g,\text{ef}} \frac{\partial t_g}{\partial z} \right] + h_{\text{conv}} (t_p - t_g) \frac{6(1 - \varepsilon)}{\delta} + \\ + r_{\text{CO+O}_2} Q_{\text{CO+O}_2} + r_{\text{H}_2+\text{O}_2} Q_{\text{H}_2+\text{O}_2} + r_{\text{CO+H}_2\text{O}} Q_{\text{CO+H}_2\text{O}}; \quad (10)$$

$$\frac{\partial u_p}{\partial z} = - \left[(k_{\text{C+O}_2} + 2k_{\text{C+0.5O}_2}) C_{\text{O}_2}^w + k_{\text{C+CO}_2} C_{\text{CO}_2}^w + k_{\text{C+H}_2\text{O}} C_{\text{H}_2\text{O}}^w \right] \frac{6\mu_c}{\rho_p \delta}; \quad (11)$$

$$(1 - \varepsilon) c_p \rho_p \frac{\partial t_p}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\lambda_{\text{ef}} \frac{\partial t_p}{\partial z} \right] + \\ + \left[(k_{\text{C+O}_2} Q_{\text{C+O}_2} + k_{\text{C+0.5O}_2} Q_{\text{C+0.5O}_2}) C_{\text{O}_2}^w - k_{\text{C+CO}_2} C_{\text{CO}_2}^w Q_{\text{C+CO}_2} - \right. \\ \left. - k_{\text{C+H}_2\text{O}} C_{\text{H}_2\text{O}}^w Q_{\text{C+H}_2\text{O}} - h_{\text{conv}} (t_p - t_g) \right] \frac{6(1 - \varepsilon)}{\delta} - Q_{\text{p} \rightarrow \text{w}}^{\text{rad+cond}} - (1 - \varepsilon) c_p \rho_p u_p \frac{\partial t_p}{\partial z} + \\ + (1 - \varepsilon) c_p t_p \left[(k_{\text{C+O}_2} + 2k_{\text{C+0.5O}_2}) C_{\text{O}_2}^w + k_{\text{C+CO}_2} C_{\text{CO}_2}^w + k_{\text{C+H}_2\text{O}} C_{\text{H}_2\text{O}}^w \right] \frac{6\mu_c}{\delta}, \quad (12)$$

де променевий та кондуктивний теплообмін між нерухомим шаром газифікатора та стінкою знаходитьться з виразу

$$Q_{\text{p} \rightarrow \text{w}}^{\text{rad+cond}} = \frac{4h_{\text{rad+cond,w}} (t_p - t_w)}{D}. \quad (13)$$

Ефективні коефіцієнти тепlopровідності фаз λ_{ef} та $\lambda_{g,\text{ef}}$, концентрації газових компонентів на поверхні частинки $C_{\text{O}_2}^w$, $C_{\text{CO}_2}^w$, $C_{\text{H}_2\text{O}}^w$, C_{CO}^w , швидкості гомогенних реакцій $r_{\text{H}_2+\text{O}_2}$, $r_{\text{CO+H}_2\text{O}}$, $r_{\text{CO+O}_2}$, коефіцієнт променевого та кондуктивного теплообміну між нерухомим шаром газифікатор-

ра та стінкою реторти $h_{\text{rad+cond,w}}$ визначається згідно з [1–7].

Границі умови на вході в шар ($z = 0$) для параболічних рівнянь (4)–(10), (12) знаходяться з виразів:

$$\begin{aligned} \frac{\partial t_p}{\partial z} &= C_{\text{CO}_2} = C_{\text{CO}} = C_{\text{H}_2} = 0, \\ C_{\text{O}_2} &= C_{\text{O}_20}, \quad C_{\text{H}_2\text{O}} = C_{\text{H}_2\text{O}0}, \\ u_g &= u_{g0}, \quad t_g = t_{g0}, \end{aligned} \quad (14)$$

на виході з шару ($z = H_{\text{bed}}$) –

$$\begin{aligned} \frac{\partial t_g}{\partial z} &= \frac{\partial C_{\text{O}_2}}{\partial z} = \frac{\partial C_{\text{CO}_2}}{\partial z} = \frac{\partial C_{\text{CO}}}{\partial z} = \\ &= \frac{\partial C_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial z} = \frac{\partial C_{\text{H}_2}}{\partial z} = \frac{\partial u_g}{\partial z} = 0, \\ t_p(z = H_{\text{bed}}) &= 650^\circ\text{C}. \end{aligned} \quad (15)$$

Для звичайного диференційного рівняння (11) початкова умова $u_p(z = H_{\text{bed}}) = u_{p0}$. Зв'язок між діаметром реагуючих коксозольних частинок лігніну $\delta(\tau, z)$ та їх швидкістю $u_p(\tau, z)$ в окислювальному та відновлювальному діапазонах може бути отримана зі співвідношення витрат лігніну на виході з відновлюальної зони (за рухом газу), де швидкості частинок $u_p(\tau, z) = u_{p0}$, та у перерізі z , який належить до зони, яку ми розглядаємо:

$$\frac{(1-\varepsilon)u_{p0}\rho_p}{(1-\varepsilon)u_p(\tau, z)\rho_p} = \left(\frac{\delta_0}{\delta(\tau, z)} \right)^3. \quad (16)$$

Параболічні рівняння (4)–(10), (12) з граничними умовами (14) та (15) інтегрувалися методом прямої та зворотної прогонок з ітераціями на кожному кроці інтегрування. Висота шару розбивалася на $i = 1$ –4000 вузлів. Було використано нерівномірну дискретну сітку, яка згущується в напрямку $z \rightarrow 0$.

Висновки

Головною відмінністю запропонованої моделі від існуючих моделей є врахування швидкості руху частинок та її градієнта $\partial u_p / \partial z$ в окислю-

вальній та відновлювальній зонах реактора через протікання гетерогенних реакцій.

У другій частині даної роботи з використанням наведеної моделі буде отримано та проаналізовано детальну інформацію щодо геометричних, аеродинамічних, теплових та фізикохімічних параметрів пароповітряної газифікації коксо-зольного залишку в збагаченій киснем пароповітряній суміші у нерухомому шарі. Ця інформація може бути використана для конструктування реакторів на стадіях ескізного, технічного та робочого проектування, пусконалагоджувальних режимах, роботі газогенератора на змінних параметрах, коли процес пароповітряної газифікації біомаси є нестационарним, на номінальному навантаженні при стаціонарному експлуатаційному режимі.

Умовні позначення

C , кмоль/м ³	концентрації газових компонентів
c , кДж/(кг·К)	теплоємність
D , м ² /с (м)	коєфіцієнт дифузії
D , м	діаметр апарату
g , м/с ²	прискорення вільного падіння
h , кДж/(с·м ² ·К)	коєфіцієнт конвективного теплообміну
k , м/с	константа швидкості реакції
P , Н/м ²	тиск
Q , кДж/кмоль	тепловий ефект реакції
Q , кДж/(с·м ³)	тепловий потік
r , кмоль/(м ³ ·с)	швидкість гомогенної реакції
t , °C	температура
u , м/с	швидкість
z , м	аксіальна координата
δ , м	діаметр частинки
ε	порозність шару
η , м ² /с	кінематична в'язкість газу
λ , кДж/(с·м·К)	коєфіцієнт тепlopровідності
μ , кг/кмоль	молекулярна маса
ρ , кг/м ³	щільність
τ , с	час

Індекси

eф	— ефективний
C	— вуглець
conv	— конвективний
cond	— кондуктивний
CO ₂ →см	— дифузія в газову суміш діоксиду вуглецю
O ₂ →см	— дифузія в газову суміш кисню
CO→см	— дифузія в газову суміш оксиду вуглецю
H ₂ O→см	— дифузія в газову суміш водяної пари
H ₂ →см	— дифузія в газову суміш водню
CO	— оксид вуглецю
CO ₂	— діоксид вуглецю
O ₂	— кисень
H ₂	— водень
d	— суха маса
daf	— суха безольна маса
g	— газ
e	— зовнішній
i = 1–4000	— число вузлів по осі z
p	— частинка
rad	— променевий

Індекси

p→w	— передача тепла від частинок до стінки
w	— стінка
0	— початкове значення параметра

Гетерогенні реакції: C + O₂, C + 0,5 O₂,
C + CO₂, C + H₂O.

Гомогенні реакції: CO + O₂, H₂ + O₂,
CO + H₂O.

Список літератури

1. Gómes-Barea A., Leckner B. Modeling of biomass gasification in fluidized bed. *Progress Energy Combust. Sci.* 2010. Vol. 36. P. 449–509.
2. Аэрор М.Э., Тодес О.М., Наринский Д.А. Аппараты со стационарным зернистым слоем. Гидравлические и тепловые основы работы. Ленинград : Химия, 1979. 176 с.
3. Westbrook C.K., Dryer F.L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combust. Sci. Technol.* 1981. Vol. 27. P. 31–43.
4. Ma J., Zitney S.E. CFD modeling of entrained-flow gasifiers with improved physical and chemical submodels. *Energy Fuels.* 2012. Vol. 26. P. 7195–7219.
5. Bustamante 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. P. 1440–1454.
6. Rokhman B. Theoretical investigation of the process of steam–oxygen gasification of coke–ash particles in a fluidized bed under pressure. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics.* 2015. Vol. 88, № 2. P. 313–328.
7. Hobbs Michael L., Radulovic Predrag T., Smoot L. Douglas. Modeling Fixed-Bed Coal Gasifiers. *AICHE J.* 1992. Vol. 38, № 5. P. 681–702.

Надійшла до редакції 23.11.2021

Рохман Б.Б.¹, докт. техн. наук,

Клюс В.П.², канд. техн. наук, **Клюс С.В.²,** канд. техн. наук

¹ **Інститут теплоенергетических технологий НАН Украины, Киев**

ул. Андреевская, 19, 04070 Киев, Украина, e-mail: brolene@yahoo.com

² **Інститут возобновляемой энергетики НАН Украины, Киев**

ул. Гната Хоткевича, 20а, 02094 Киев, Украина, e-mail: biomassa@ukr.net

Математическое моделирование и численное исследование процесса газификации фиксированного углерода биомасы

в плотном слое при атмосферном давлении. Часть 1. Теоретическое описание конверсии коксозольных частиц в недвижимом слое

На основе приведенной системы параболических уравнений, описывающей процесс конверсии коксозольного остатка в паро-воздушной смеси, обогащенной кислородом, построена нестационарная модель газификации твердого топлива в фиксированном слое с учетом межфазного конвективного теплообмена, радиационно-кондуктивного теплопереноса твердой фазы, лучистого и кондуктивного теплообмена слоя со стенкой реактора, гетерогенных и гомогенных химических реакций, сил тяжести и аэродинамического сопротивления. Предложенная модель позволяет получить детальную информацию о геометрических, аэродинамических, тепловых и физико-химических параметрах газификации твердого топлива в неподвижном слое при различных давлениях в любой момент времени. *Библ. 7, рис. 1.*

Ключевые слова: математическое моделирование, процесс газификации, биомасса, конверсия коксозольных частиц.

Rokhman B.B.¹, Doctor of Technical Sciences, Klius V.P.¹, Candidate of Technical Sciences, Klius S.V.¹, Candidate of Technical Sciences

¹ Thermal Energy Technology Institute of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv

19, Andriivska Str., 04070 Kyiv, Ukraine, e-mail: brolene@yahoo.com

² Institute of Renewable Energy of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv

20a, Gnata Hotkevycha Str., 02094 Kyiv, Ukraine, e-mail: biomass@ukr.net

Mathematical Modeling and Numerical Study of Biomass Fixed Carbon Gasification in a Dense Bed at Atmospheric Pressure. Part 1. Theoretical Description of Coke Particles Conversion in a Fixed Bed

Based on a system of parabolic equations describing the process of conversion of coke ash residue in an oxygen-enriched vapor-air mixture, a non-stationary model of solid fuel gasification in a fixed layer is built. This model takes into account an interphase convective heat transfer, radiation-conductive heat transfer of the solid phase, radiant and conductive heat exchange of the layer with the reactor wall, heterogeneous and homogeneous chemical reactions, gravity forces and aerodynamic drag. The proposed model allows to obtain detailed in-

formation about the geometric, aerodynamic, thermal and physicochemical parameters of gasification of solid fuel in a fixed bed at different pressures at any time. *Bibl. 7, Fig. 1.*

Keywords: mathematical modeling, gasification process, biomass, conversion of coke particles.

References

1. Gómes-Barea A. and Leckner B. Modeling of biomass gasification in fluidized bed. *Progress Energy Combust. Sci.* 2010. 36. pp. 449–509.
2. Aerov M.E., Todes O.M., Narinskii D.A. Apparatus so statcionarnym zernistym sloem. Gidravlicheskie i teplovye osnovy raboty. [Devices with a stationary granular layer. Hydraulic and thermal basis of work]. Le-ningrad : Khimiia, 1979, 176 p. (Rus.)
3. Westbrook C.K. and Dryer F.L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combust. Sci. Technol.* 1981. 27. pp. 31–43.
4. Ma J. and Zitney S.E. CFD modeling of entrained-flow gasifiers with improved physical and chemical submodels. *Energy Fuels.* 2012. 26. pp. 7195–7219.
5. Bustamante F., Enick R.M., Killmeyer R.P., Howard B.H., Rothenberger K.S., Cugini A.V., Morreale B.D., and Ciocco M.V. Uncatalyzed and wall-catalyzed forward water-gas shift reaction kinetics. *AICHE J.* 2005. 51. pp. 1440–1454.
6. Rokhman B. Theoretical investigation of the process of steam–oxygen gasification of coke–ash particles in a fluidized bed under pressure. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics.* 2015. 88 (2). pp. 313–328.
7. Hobbs Michael L., Radulovic Predrag T., and Smoot L. Douglas. Modeling Fixed-Bed Coal Gasifiers. *AICHE J.* 1992. 38 (5). pp. 681–702.

Received November 23, 2022