УДК 532.529: 517.4

Б.Б.Рохман[1], докт.техн.наук (Институт угольных энерготехнологий НАН Украины, Киев), **В.Г.Выфатнюк[2], Д.В.Выфатнюк[3]** (СПКТБ "Энергомашпроект", Киев), **А.С.Квасневский[4]** (Институт газа НАН Украины, Киев)

Теоретическое исследование процесса газификации мелкодисперсной пыли бурого угля Мокрокалыгорского месторождения в вертикальном поточном газификаторе под давлением 4,2 МПа

Построена модель аэродинамики, тепловых и физико-химических процессов в высокотемпературном поточном газификаторе. С ее помощью получена детальная информация о параметрах парокислородной газификации бурого угля, необходимая для конструирования пилотной и промышленной установок. Показано, что жидкий шлак формируется по всей высоте реактора, а его максимальная температура в окислительной зоне достигает 2500 °С, что необходимо учитывать при разработке конструкции обмуровки. Предложен двухслойный торкрет и выбраны огнеупорные материалы для первого (окись циркония, карбиды бериллия и титана) и второго (карбидокремниевая масса) слоев. Подобраны оптимальные отношения расходов O_2/уголь и H_2O/уголь, при которых в синтез-газе CO + H_2 = 88-92%; CO_2 + H_2O = 3,7-6,7%, степень конверсии углерода 99,9% и калорийность газа 11 МДж/нм^3. Библ. 7, табл. 2, рис. 5.

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

ORCID: [1]0000-0002-1270-6102; [2]0000-0003-0771-2652; [3]0000-0002-7823-2560; [4]0000-0002-2213-6481

Обозначения

A, N, O, S, V, W	массовые доли золы, азота, кислорода, серы, летучих веществ и влаги в твердом топливе	$Q^{\text{г}}_{\text{н}}$	низшая теплота сгорания (на рабочую массу), кДж/кг
B	расход, кг/ч	R	объемная доля компонента газовой смеси
C	концентрации газовых компонентов (кмоль/м^3) или массовая доля углерода в твердом топливе	R_{g}	универсальная газовая постоянная, кДж/(кмоль·К)
c	теплоемкость, кДж/(кг·К)	t	температура, °С
C_{d}	коэффициент аэродинамического сопротивления частицы	T	температура, К
E	энергия активации, кДж/кмоль	u	скорость, м/с
F	сила, Н/м^3	z	аксиальная координата, м
f	сечение, м^2	α	коэффициент массообмена, м/с
H	высота (м) или массовая доля водорода	α_1, α_2	коэффициенты выхода летучих
h	коэффициент конвективного теплообмена, кДж/(с·м^2·К)	β	истинная объемная концентрация частиц
g	ускорение свободного падения, м/с^2	δ	диаметр частицы, м
k	константа скорости реакции, м/с	η	постоянная спада экспоненты, 1/м
k_{01}, k_{02}	константы скоростей выхода летучих, с$^{-1}$	μ	молекулярная масса, кг/кмоль
K_{eq}	константа равновесия	ρ	плотность, кг/м^3
P	давление газа, Н/м^2	φ	степень конверсии углерода
Q	тепловой эффект реакции (кДж/кмоль) или тепловой поток (кДж/(с·м^3))	M	количество фракций

Индексы нижние: a – сила аэродинамического сопротивления частицы; ash – зола; C – углерод; $C_{\text{ф}}$ – фиксированный углерод; CO, CO_2, CH_4, H_2O, H_2, N_2, C_6H_6, SO_2, C_2H_6 – окись и двуокись углерода, метан, водяной пар, водород, азот, бензол, сернистый ангидрид, этан; C + O_2, C + 0,5O_2, C + CO_2, C + H_2, C + H_2O – гетерогенные реакции; CO + O_2, CH_4 + O_2, H_2 + O_2, CH_4 + H_2O, C_6H_6 + H_2O, C_6H_6 + O_2, CO + H_2O, C_2H_6 + O_2 – гомогенные реакции; conv – конвективный теплообмен; D – диффузия; eq – константа равновесия; fuel – исходный уголь; g – газ; gor – горючая масса; g→slag, *j*→slag, *s*→slag, *j*→g, *s*→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; rerad – переизлучение; r – реактор; slag – шлак; БУ – бурый уголь; лет – летучие; огн – огнеупорный; ф – фиксированный; I-III – номера вариантов; 0 – начальные условия.

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

© Б.Б.Рохман, В.Г.Выфатнюк, Д.В.Выфатнюк, А.С.Квасневский, 2016

Введение. Экономия дорогостоящего импортируемого природного газа в производстве аммиака (основного сырья для получения азотных удобрений), метанола, уксусной кислоты и т.д. – одна из важнейших задач химической промышленности. Эффективным практическим решением поставленной задачи является замена природного газа синтетическим путем парокислородной газификации в высокотемпературном потоке под давлением бурых или каменных углей, биоэнергетических ресурсов или бинарных твердотопливных смесей (бурые и каменные угли, биоэнергетические ресурсы и бурые (или каменные) угли). Для этого необходимо разработать конструкцию реактора-газификатора на основе результатов расчета геометрических, аэродинамических, тепловых и физико-химических параметров процесса парокислородной газификации мелкодисперсной пыли твердого топлива, полученных из математической модели.

В [1, 2] приведена модель тепломассообмена и химического реагирования газодисперсного восходящего высокотемпературного потока. Предполагается, что летучие вещества в составе CO, CH_4, CO_2, H_2O, H_2 и H_2S выходят из угольных частиц мгновенно, а тяжелые углеводороды в виде C_6H_6 остаются в частице и подвергаются термохимической переработке вместе с фиксированным углеродом. При этом объемные доли упомянутых газовых компонентов летучих определяются из элементарного состава исходного топлива. В [1, 2] используется ограниченная стехиометрическая схема реакций: пять гетерогенных и четыре гомогенные. Здесь не учитывается изменение расхода золы по высоте реактора за счет миграции из ядра потока в пристеночную зону зольных частиц, которые формируют на поверхности обмуровки пленку жидкого шлака. В [3] летучие вещества представляются формулой кислородосодержащего соединения $CH_{2,404}O_{0,522}$, которое при высокоскоростном высокотемпературном нагреве распадается на газовые компоненты CO, C_7H_8 и H_2, после чего C_7H_8 и H_2 взаимодействуют между собой, образуя C_6H_6 и CH_4. По сравнению с [1, 2] стехиометрическая схема реакций существенно расширена. Она включает в себя пять гетерогенных и пятнадцать гомогенных реакций. Согласно принятой в [3] гипотезе сера не покидает частицу, поэтому в летучих веществах и синтетическом газе отсутствуют компоненты H_2S или SO_2. В отличие от [1, 2] выход пиролизных газов происходит не мгновенно, а во времени и существенно зависит от температуры пылевидных частиц, что следует из выражения [4]:

$$B_{\text{gor}j} = B_{\text{gor}j0} - \int_0^{H_r} \left(k_{01j} \exp\left[-104{,}6\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}} \, (t_{\text{p}j} + 273) \right) \right] + \right.$$

$$\left. + k_{02j} \exp\left[-167\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}} \, (t_{\text{p}j} + 273) \right) \right] \right) \frac{dz}{u_{\text{p},j}} . \quad (1)$$

Кроме того, в [3] учитывается изменение расхода зольных частиц по высоте реактора:

$$B_{\text{p}s} = B_{\text{p}s0} \exp(-\eta z) . \quad (2)$$

В настоящей работе предлагается обобщенная модель парокислородной газификации пылевидных угольных частиц в высокотемпературном восходящем потоке с расширенной стехиометрической схемой реакций (пять гетерогенных и двенадцать гомогенных). Здесь предусмотрен выход летучих веществ из пылевидных частиц согласно (1) в составе газовых компонентов H_2, H_2O, CO, CO_2, CH_4, C_6H_6, SO_2 и C_2H_6, объемные доли которых находятся из элементарного состава исходного топлива. Для бурого угля Мокрокалыгорского месторождения ($C_{\text{ф}}^{\text{r}}$ = 32,64%, $C_{\text{лет}}^{\text{r}}$ = = 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%) состав компонентов пиролизных газов можно представить в виде: H_2 = 0,17%, H_2O = 28%, CO = 2,14%, CO_2 = = 1,83%, CH_4 = 13,3%, C_6H_6 = 40,4%, SO_2 = = 13,54% и C_2H_6 = 0,62%. В модели учитывается лучистый и конвективный теплообмен между газом и частицами, газодисперсным потоком и шлаковой пленкой, межфракционное переизлучение, тепловые эффекты гетерогенных и гомогенных реакций, силы тяжести и межфазного взаимодействия, уменьшение расхода зольных частиц по высоте реактора согласно (2).

В работе рассматривается одностадийный процесс парокислородной газификации пылевидного бурого угля, когда бинарная смесь (пыль *1*, пар и кислород *2*) поступает в нижнюю окислительную область газогенератора, где происходит прогрев газодисперсного потока, выход и горе-

ние пиролизных газов с последующей конверсией углеродного остатка в бескислородной восстановительной зоне (рис. 1). Жидкий шлак *5* выводится из реактора через нижний патрубок *4*, а синтетический газ – через верхнюю горловину *6*.

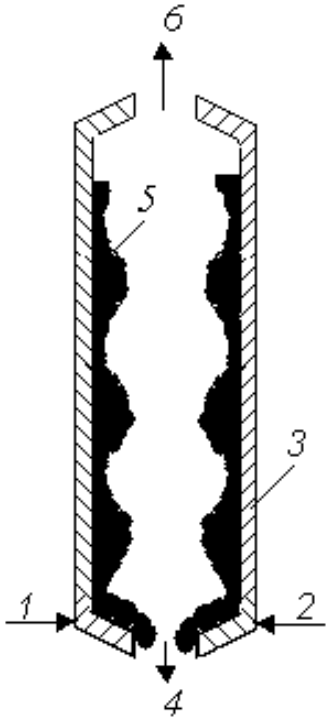


Рис. 1. Одноступенчатая схема парокислородной газификации бурого угля:
1 – бурый уголь; 2 – смесь кислорода и водяного пара; 3 – обмуровка; 4 – выход шлака; 5 – шлаковая пленка; 6 – выход синтетического газа.

Постановка задачи. 1) процесс стационарный; 2) газовая смесь в реакторе состоит из кислорода, азота, диоксида и оксида углерода, метана, водяного пара, водорода, бензола, этана и сернистого ангидрида; 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 сростка 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) компоненты газовой смеси N_2 и SO_2 не вступают в реакции; 6) газ и твердая фаза движутся в режиме идеального вытеснения; 7) стехиометрическая схема реакций включает в себя пять гетерогенных реакций: $C + O_2 = CO_2$, $C + 0{,}5O_2 = CO$, $C + CO_2 = 2CO$, $C + H_2O = CO + H_2$ и $C + 2H_2 = CH_4$ и двенадцать гомогенных: $CO + 0{,}5O_2 = CO_2$, $CH_4 + 0{,}5O_2 = CO + 2H_2$, $H_2 + 0{,}5O_2 = H_2O$, $CO + H_2O = CO_2 + H_2$, $CO_2 + H_2 = CO + H_2O$, $CH_4 + H_2O = CO + 3H_2$, $CO + 3H_2 = CH_4 + H_2O$, $C_6H_6 + 5H_2O = 5CO + 6H_2 + CH_4$, $C_6H_6 + 6H_2O = 9H_2 + 6CO$, $C_6H_6 + 7{,}5O_2 = 6CO_2 + 3H_2O$, $C_6H_6 + 3O_2 = 6CO + 3H_2$ и $C_2H_6 + 2{,}5O_2 = 2CO + 3H_2O$; 8) расход золы экспоненциально убывает по высоте реактора за счет миграции зольных частиц из ядра потока в пристеночную зону, где происходит формирование пленки жидкого шлака на поверхности обмуровки.

Основные уравнения. Система уравнений, описывающая тепловые и физико-химические процессы в вертикальном газификаторе, имеет следующий вид.

Уравнение неразрывности для кислорода:

$$\frac{d(u_{\mathrm{g}}C_{\mathrm{O_2}})}{dz} = -6\sum_{j=1}^{\mathrm{M_C}}\frac{\alpha_{\mathrm{D,O_2}j}(C_{\mathrm{O_2}} - C_{\mathrm{O_2}j}^{\mathrm{w}})\beta_j}{\delta_{\mathrm{C}j}} - 0{,}5\cdot 2{,}239\cdot 10^{12} C_{\mathrm{CO}} C_{\mathrm{H_2O}}^{0{,}5} C_{\mathrm{O_2}}^{0{,}25} \times$$
$$\times \exp\left[-167{,}4\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\mathrm{g}}\ (t_{\mathrm{g}} + 273)\right)\right] - 0{,}5\cdot 4{,}4\cdot 10^{11} T_g^0 C_{\mathrm{CH_4}}^{0{,}5} C_{\mathrm{O_2}}^{1{,}25} \exp\left[-126\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\mathrm{g}}\ (t_{\mathrm{g}} + 273)\right)\right] -$$
$$-0{,}5\cdot 6{,}8\cdot 10^{15} T_g^{-1} C_{\mathrm{H_2}}^{0{,}25} C_{\mathrm{O_2}}^{1{,}5} \exp\left[-167\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\mathrm{g}}\ (t_{\mathrm{g}} + 273)\right)\right] - 7{,}5\cdot 1{,}35\cdot 10^9 C_{\mathrm{C_6H_6}}^{-0.1} C_{\mathrm{O_2}}^{1{,}85} \times$$
$$\times \exp\left[-125\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\mathrm{g}}\ (t_{\mathrm{g}} + 273)\right)\right] - 3\cdot 1{,}58\cdot 10^{15} C_{\mathrm{C_6H_6}} C_{\mathrm{O_2}} \exp\left[-202{,}6\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\mathrm{g}}\ (t_{\mathrm{g}} + 273)\right)\right] -$$
$$-2{,}5\cdot 7{,}3\cdot 10^{10} C_{\mathrm{C_2H_6}}^{0{,}1} C_{\mathrm{O_2}}^{1{,}65} \exp\left[-125{,}5\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\mathrm{g}}\ (t_{\mathrm{g}} + 273)\right)\right]. \qquad (3)$$

Уравнение неразрывности для сернистого ангидрида:

$$\frac{d(u_{\text{g}}C_{\text{SO}_2})}{dz}=\sum_{j=1}^{\text{M}_\text{C}}\left(\alpha_1 k_{01j}\exp\left[-104{,}6\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{p}j}+273)\right)\right]+\alpha_2 k_{02j}\exp\left[-167\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{p}j}+273)\right)\right]\right)\times$$

$$\times\frac{B_{\text{gor}j}\cdot\text{SO}_2}{\mu_{\text{SO}_2}u_{\text{p},j}f_{\text{r}}100},\ \alpha_1=0{,}36,\ \alpha_2=0{,}87. \tag{4}$$

Уравнение неразрывности для этана:

$$\frac{d(u_{\text{g}}C_{\text{C}_2\text{H}_6})}{dz}=-7{,}3\cdot10^{10}C_{\text{C}_2\text{H}_6}^{0{,}1}C_{\text{O}_2}^{1{,}65}\exp\left[-125{,}5\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]+$$

$$+\sum_{j=1}^{\text{M}_\text{C}}\left(\alpha_1 k_{01j}\exp\left[-104{,}6\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{p}j}+273)\right)\right]+\alpha_2 k_{02j}\exp\left[-167\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{p}j}+273)\right)\right]\right)\times$$

$$\times\frac{B_{\text{gor}j}\cdot\text{C}_2\text{H}_6}{\mu_{\text{C}_2\text{H}_6}u_{\text{p},j}f_{\text{r}}100}. \tag{5}$$

Уравнение неразрывности для диоксида углерода:

$$\frac{d(u_{\text{g}}C_{\text{CO}_2})}{dz}=6\sum_{j=1}^{\text{M}_\text{C}}\alpha_{\text{D},\text{CO}_2j}(C_{\text{CO}_2j}^{\text{w}}-C_{\text{CO}_2})\frac{\beta_j}{\delta_{\text{C}j}}+2{,}239\cdot10^{12}C_{\text{CO}}C_{\text{H}_2\text{O}}^{0{,}5}C_{\text{O}_2}^{0{,}25}\times$$

$$\times\exp\left[-167{,}4\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]+2{,}34\cdot10^{10}\exp\left[-288{,}3\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]C_{\text{H}_2\text{O}}C_{\text{CO}}^{0{,}5}-$$

$$-2{,}2\cdot10^7\exp\left[-190\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]C_{\text{H}_2}^{0{,}5}C_{\text{CO}_2}+6\cdot1{,}35\cdot10^9C_{\text{C}_6\text{H}_6}^{-0.1}C_{\text{O}_2}^{1{,}85}\times$$

$$\times\exp\left[-125\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]+$$

$$+\sum_{j=1}^{\text{M}_\text{C}}\left(\alpha_1 k_{01j}\exp\left[-104{,}6\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{p}j}+273)\right)\right]+\alpha_2 k_{02j}\exp\left[-167\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{p}j}+273)\right)\right]\right)\times$$

$$\times\frac{B_{\text{gor}j}\cdot\text{CO}_2}{\mu_{\text{CO}_2}u_{\text{p},j}f_{\text{r}}100}. \tag{6}$$

Уравнение неразрывности для окиси углерода:

$$\frac{d(u_{\text{g}}C_{\text{CO}})}{dz}=6\sum_{j=1}^{\text{M}_\text{C}}\alpha_{\text{D},\text{CO}j}(C_{\text{CO}j}^{\text{w}}-C_{\text{CO}})\frac{\beta_j}{\delta_{\text{C},j}}-2{,}239\cdot10^{12}C_{\text{CO}}C_{\text{H}_2\text{O}}^{0{,}5}C_{\text{O}_2}^{0{,}25}\times$$

$$\times\exp\left[-167{,}4\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]-\left(2{,}34\cdot10^{10}\exp\left[-288{,}3\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]C_{\text{H}_2\text{O}}C_{\text{CO}}^{0{,}5}-\right.$$

$$\left.-2{,}2\cdot10^7\exp\left[-190\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]C_{\text{H}_2}^{0{,}5}C_{\text{CO}_2}\right)+4{,}4\cdot10^{11}T_g^0C_{\text{CH}_4}^{0{,}5}C_{\text{O}_2}^{1{,}25}\times$$

$$\times\exp\left[-126\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]+8\cdot10^7C_{\text{CH}_4}^{0{,}5}C_{\text{H}_2\text{O}}\exp\left[-251\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]-$$

$$-5{,}12\cdot10^{-14}C_{\text{CO}}C_{\text{H}_2}\exp\left[-27{,}3\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]+6\cdot1{,}58\cdot10^{15}C_{\text{C}_6\text{H}_6}C_{\text{O}_2}\times$$

$$\times\exp\left[-202{,}6\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]+6\cdot8\cdot10^8C_{\text{C}_6\text{H}_6}^{0{,}5}C_{\text{H}_2\text{O}}\exp\left[-251\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]+$$

$$+5\cdot4{,}4\cdot10^8C_{\text{C}_6\text{H}_6}C_{\text{H}_2\text{O}}\exp\left[-220\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]+$$

$$+2\cdot7{,}3\cdot10^{10}C_{\text{C}_2\text{H}_6}^{0{,}1}C_{\text{O}_2}^{1{,}65}\exp\left[-125{,}5\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}}+273)\right)\right]+$$

$$+\sum_{j=1}^{\text{M}_\text{C}}\left(\alpha_1 k_{01j}\exp\left[-104{,}6\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{p}j}+273)\right)\right]+\alpha_2 k_{02j}\exp\left[-167\cdot10^3\Big/\left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{p}j}+273)\right)\right]\right)\times$$

$$\times \frac{B_{\text{gor}j} \cdot \text{CO}}{\mu_{\text{CO}}\, u_{\text{p},j}\, f_{\text{r}}\, 100}. \tag{7}$$

Уравнение неразрывности для метана:

$$\frac{d(u_{\text{g}} C_{\text{CH}_4})}{dz} = -4{,}4\cdot 10^{11} T_g^0 C_{\text{CH}_4}^{0,5} C_{\text{O}_2}^{1,25} \exp\left[-126\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] +$$

$$+ \sum_{j=1}^{\text{M}_\text{C}} 7{,}2\beta_j \exp\left(-\frac{E_{\text{C}+\text{H}_2 j}}{R_{\text{g}}(t_{Cj} + 273)}\right)\left[P_{\text{H}_2} 10^{-5} - \sqrt{P_{\text{CH}_4} 10^{-5} / K_{\text{eq,C}+\text{H}_2 j}}\right] / (\delta_{Cj}\, \mu_{\text{C}}) -$$

$$-\left(8\cdot 10^7 C_{\text{CH}_4}^{0,5} C_{\text{H}_2\text{O}} \exp\left[-251\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] - 5{,}12\cdot 10^{-14} C_{\text{CO}} C_{\text{H}_2} \times\right.$$

$$\left.\times \exp\left[-27{,}3\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right]\right) + 4{,}4\cdot 10^8 C_{\text{C}_6\text{H}_6} C_{\text{H}_2\text{O}} \exp\left[-220\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] +$$

$$+ \sum_{j=1}^{\text{M}_\text{C}} \left(\alpha_1 k_{01j} \exp\left[-104{,}6\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{p}j} + 273)\right)\right] + \alpha_2 k_{02j} \exp\left[-167\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{p}j} + 273)\right)\right]\right) \times$$

$$\times \frac{B_{\text{gor}j} \cdot \text{CH}_4}{\mu_{\text{CH}_4}\, u_{\text{p},j}\, f_{\text{r}}\, 100}. \tag{8}$$

Уравнение неразрывности для пара:

$$\frac{d(u_{\text{g}} C_{\text{H}_2\text{O}})}{dz} = -6 \sum_{j=1}^{\text{M}_\text{C}} \frac{k_{\text{C}+\text{H}_2\text{O}j} C_{\text{H}_2\text{O}j}^{\text{w}} \beta_j}{\delta_{Cj}} + 6{,}8\cdot 10^{15} T_g^{-1} C_{\text{H}_2}^{0,25} C_{\text{O}_2}^{1,5} \exp\left[-167\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] -$$

$$-\left(2{,}34\cdot 10^{10} \exp\left[-288{,}3\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] C_{\text{H}_2\text{O}} C_{\text{CO}}^{0,5} -\right.$$

$$\left.-2{,}2\cdot 10^7 \exp\left[-190\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] C_{\text{H}_2}^{0,5} C_{\text{CO}_2}\right) -$$

$$-\left(8\cdot 10^7 C_{\text{CH}_4}^{0,5} C_{\text{H}_2\text{O}} \exp\left[-251\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] - 5{,}12\cdot 10^{-14} C_{\text{CO}} C_{\text{H}_2} \times\right.$$

$$\left.\times \exp\left[-27{,}3\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right]\right) - 6\cdot 8\cdot 10^8 C_{\text{C}_6\text{H}_6}^{0,5} C_{\text{H}_2\text{O}} \exp\left[-251\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] -$$

$$-5\cdot 4{,}4\cdot 10^8 C_{\text{C}_6\text{H}_6} C_{\text{H}_2\text{O}} \exp\left[-220\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] + 3\cdot 1{,}35\cdot 10^9 C_{\text{C}_6\text{H}_6}^{-0.1} C_{\text{O}_2}^{1,85} \times$$

$$\times \exp\left[-125\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] +$$

$$+3\cdot 7{,}3\cdot 10^{10} C_{\text{C}_2\text{H}_6}^{0,1} C_{\text{O}_2}^{1,65} \exp\left[-125{,}5\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] +$$

$$+ \sum_{j=1}^{\text{M}_\text{C}} \left(\alpha_1 k_{01j} \exp\left[-104{,}6\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{p}j} + 273)\right)\right] + \alpha_2 k_{02j} \exp\left[-167\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{p}j} + 273)\right)\right]\right) \times$$

$$\times \frac{B_{\text{gor}j} \cdot \text{H}_2\text{O}}{\mu_{\text{H}_2\text{O}}\, u_{\text{p},j}\, f_{\text{r}}\, 100}. \tag{9}$$

Уравнение неразрывности для водорода:

$$\frac{d(u_{\text{g}} C_{\text{H}_2})}{dz} = 6 \sum_{j=1}^{\text{M}_\text{C}} \frac{k_{\text{C}+\text{H}_2\text{O}j} C_{\text{H}_2\text{O}j}^{\text{w}} \beta_j}{\delta_{Cj}} - 6{,}8\cdot 10^{15} T_g^{-1} C_{\text{H}_2}^{0,25} C_{\text{O}_2}^{1,5} \exp\left[-167\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] +$$

$$+2{,}34\cdot 10^{10} \exp\left[-288{,}3\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] C_{\text{H}_2\text{O}} C_{\text{CO}}^{0,5} -$$

$$-2{,}2\cdot 10^7 \exp\left[-190\cdot 10^3 \Big/ \left(R_{\text{g}}\ (t_{\text{g}} + 273)\right)\right] C_{\text{H}_2}^{0,5} C_{\text{CO}_2} + 3\cdot 8\cdot 10^7 C_{\text{CH}_4}^{0,5} C_{\text{H}_2\text{O}} \times$$

$$\times\exp\left[-251\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{\rm g}+273)\right)\right]-3\cdot5{,}12\cdot10^{-14}C_{\rm CO}C_{\rm H_2}\exp\left[-27{,}3\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{\rm g}+273)\right)\right]+$$

$$+3\cdot1{,}58\cdot10^{15}C_{\rm C_6H_6}C_{\rm O_2}\exp\left[-202{,}6\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{\rm g}+273)\right)\right]+$$

$$+2\cdot4{,}4\cdot10^{11}T_g^0C_{\rm CH_4}^{0,5}C_{\rm O_2}^{1,25}\exp\left[-126\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{\rm g}+273)\right)\right]+$$

$$+9\cdot8\cdot10^8C_{\rm C_6H_6}^{0,5}C_{\rm H_2O}\exp\left[-251\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{\rm g}+273)\right)\right]+$$

$$+6\cdot4{,}4\cdot10^8C_{\rm C_6H_6}C_{\rm H_2O}\exp\left[-220\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{\rm g}+273)\right)\right]-$$

$$-2\sum_{j=1}^{\rm M_C}7{,}2\beta_j\exp\left(-\frac{E_{{\rm C+H_2}j}}{R_{\rm g}(t_{{\rm C}j}+273)}\right)\left[P_{\rm H_2}10^{-5}-\sqrt{P_{\rm CH_4}10^{-5}/K_{{\rm eq,C+H_2}j}}\right]/(\delta_{{\rm C}j}\,\mu_{\rm C})+$$

$$+\sum_{j=1}^{\rm M_C}\left(\alpha_1 k_{01j}\exp\left[-104{,}6\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{{\rm p}j}+273)\right)\right]+\alpha_2 k_{02j}\exp\left[-167\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{{\rm p}j}+273)\right)\right]\right)\times$$

$$\times\frac{B_{{\rm gor}j}\cdot{\rm H_2}}{\mu_{\rm H_2}u_{{\rm p},j}f_{\rm r}100}. \qquad (10)$$

Уравнения неразрывности для бензола и азота:

$$\frac{d(u_{\rm g}C_{\rm C_6H_6})}{dz}=-1{,}58\cdot10^{15}C_{\rm C_6H_6}C_{\rm O_2}\exp\left[-202{,}6\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{\rm g}+273)\right)\right]-$$

$$-8\cdot10^8C_{\rm C_6H_6}^{0,5}C_{\rm H_2O}\exp\left[-251\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{\rm g}+273)\right)\right]-4{,}4\cdot10^8C_{\rm C_6H_6}C_{\rm H_2O}\times$$

$$\times\exp\left[-220\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{\rm g}+273)\right)\right]-1{,}35\cdot10^9C_{\rm C_6H_6}^{-0.1}C_{\rm O_2}^{1,85}\exp\left[-125\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{\rm g}+273)\right)\right]+$$

$$+\sum_{j=1}^{\rm M_C}\left(\alpha_1 k_{01j}\exp\left[-104{,}6\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{{\rm p}j}+273)\right)\right]+\alpha_2 k_{02j}\exp\left[-167\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{{\rm p}j}+273)\right)\right]\right)\times$$

$$\times\frac{B_{{\rm gor}j}\cdot{\rm C_6H_6}}{\mu_{\rm C_6H_6}u_{{\rm p},j}f_{\rm r}100},\ \frac{d(u_{\rm g}C_{\rm N_2})}{dz}=0. \qquad (11)$$

Уравнения неразрывности частиц кокса фракции j:

$$\frac{d(\beta_j u_{{\rm p},j})}{dz}=-\left[(k_{{\rm C+O_2}j}+2k_{{\rm C+0.5O_2}j})C_{{\rm O_2}j}^{\rm w}+k_{{\rm C+CO_2}j}C_{{\rm CO_2}j}^{\rm w}+k_{{\rm C+H_2O}j}C_{{\rm H_2O}j}^{\rm w}\right]\frac{6\mu_{\rm C}\beta_j}{\delta_{{\rm C}j}\rho_{{\rm C}j}}-$$

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

$$-\left(k_{01j}\exp\left[-104{,}6\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{{\rm p}j}+273)\right)\right]+k_{02j}\exp\left[-167\cdot10^3/\left(R_{\rm g}\ (t_{{\rm p}j}+273)\right)\right]\right)\frac{B_{{\rm gor}j}}{u_{{\rm p},j}\rho_{{\rm C}j}f_{\rm r}}. \qquad (12)$$

Уравнение переноса импульса частиц фракции i:

$$\frac{d(\beta_i u_{{\rm p}i}^2)}{dz}=\frac{F_{ai}}{\rho_{{\rm p}i}}-g\beta_i,\ F_{ai}=\frac{3}{4}\rho_{\rm g}C_d\left|u_{\rm g}-u_{{\rm p}i}\right|(u_{\rm g}-u_{{\rm p}i})\frac{\beta_i}{\delta_i}. \qquad (13)$$

Уравнение сохранения количества движения газовой фазы:

$$\frac{d(\rho_{\rm g}u_{\rm g}^2)}{dz}=-\frac{dP_{\rm g}}{dz}-g\rho_{\rm g}-\sum_{i=1}^{\rm M_C+M_{ash}}F_{ai}. \qquad (14)$$

Уравнение сохранения энергии газа:

$$\frac{d(\rho_g u_g c_g t_g)}{dz} = 6\sum_{i=1}^{M_C+M_{ash}} h_{convi}(t_{pi}-t_g)\frac{\beta_i}{\delta_i} - Q_{rad,g\to slag} + \sum_{i=1}^{M_C+M_{ash}} Q_{rad,i\to g} +$$
$$+2{,}239\cdot10^{12}C_{CO}C_{H_2O}^{0,5}C_{O_2}^{0,25}\exp\left[-167{,}4\cdot10^3/\left(R_g\,(t_g+273)\right)\right]Q_{CO+O_2} +$$
$$+6{,}8\cdot10^{15}T_g^{-1}C_{H_2}^{0,25}C_{O_2}^{1,5}\exp\left[-167\cdot10^3/\left(R_g\,(t_g+273)\right)\right]Q_{H_2+O_2} +$$
$$+4{,}4\cdot10^{11}T_g^{0}C_{CH_4}^{0,5}C_{O_2}^{1,25}\exp\left[-126\cdot10^3/\left(R_g\,(t_g+273)\right)\right]Q_{CH_4+O_2} +$$
$$+1{,}58\cdot10^{15}C_{C_6H_6}C_{O_2}\exp\left[-202{,}6\cdot10^3/\left(R_g\,(t_g+273)\right)\right]Q_{C_6H_6+O_2} +$$
$$+\left(2{,}34\cdot10^{10}\exp\left[-288{,}3\cdot10^3/\left(R_g\,(t_g+273)\right)\right]C_{H_2O}C_{CO}^{0,5} -\right.$$
$$\left.-2{,}2\cdot10^{7}\exp\left[-190\cdot10^3/\left(R_g\,(t_g+273)\right)\right]C_{H_2}^{0,5}C_{CO_2}\right)Q_{CO+H_2O} -$$
$$-\left(8\cdot10^{7}C_{CH_4}^{0,5}C_{H_2O}\exp\left[-251\cdot10^3/\left(R_g\,(t_g+273)\right)\right] - 5{,}12\cdot10^{-14}C_{CO}C_{H_2}\times\right.$$
$$\left.\times\exp\left[-27{,}3\cdot10^3/\left(R_g\,(t_g+273)\right)\right]\right)Q_{CH_4+H_2O} -$$
$$-8\cdot10^{8}C_{C_6H_6}^{0,5}C_{H_2O}\exp\left[-251\cdot10^3/\left(R_g\,(t_g+273)\right)\right]Q_{C_6H_6+H_2O} -$$
$$-4{,}4\cdot10^{8}C_{C_6H_6}C_{H_2O}\exp\left[-220\cdot10^3/\left(R_g\,(t_g+273)\right)\right]Q'_{C_6H_6+H_2O} +$$
$$+1{,}35\cdot10^{9}C_{C_6H_6}^{-0.1}C_{O_2}^{1,85}\exp\left[-125\cdot10^3/\left(R_g\,(t_g+273)\right)\right]Q'_{C_6H_6+O_2} +$$
$$+7{,}3\cdot10^{10}C_{C_2H_6}^{0,1}C_{O_2}^{1,65}\exp\left[-125{,}5\cdot10^3/\left(R_g\,(t_g+273)\right)\right]Q_{C_2H_6+O_2}. \qquad (15)$$

Уравнение теплового баланса частиц кокса фракции *j*:

$$\frac{d(\beta_j u_{pj} c_{pj} t_{pj})}{dz} = \left[(k_{C+O_2 j}Q_{C+O_2} + k_{C+0{,}5O_2 j}Q_{C+0{,}5O_2})C_{O_2 j}^{w} - k_{C+CO_2 j}C_{CO_2 j}^{w}Q_{C+CO_2} -\right.$$
$$\left.-k_{C+H_2O j}C_{H_2O j}^{w}Q_{C+H_2O} - h_{convj}(t_{pj}-t_g)\right]\frac{6\beta_j}{\delta_{Cj}\rho_{Cj}} - \frac{Q_{radj\to slag}}{\rho_{Cj}} - \frac{Q_{radj\to g}}{\rho_{Cj}} - \frac{Q_{reradj}}{\rho_{Cj}} +$$
$$+7{,}2\beta_j\exp\left(-\frac{E_{C+H_2 j}}{R_g(t_{Cj}+273)}\right)\left[P_{H_2}10^{-5} - \sqrt{P_{CH_4}10^{-5}/K_{eq,C+H_2 j}}\right]\frac{Q_{C+H_2}}{\rho_{Cj}} -$$
$$-c_{pj}t_{pj}\left(k_{01j}\exp\left[-104{,}6\cdot10^3/\left(R_g\,(t_{pj}+273)\right)\right] + k_{02j}\exp\left[-167\cdot10^3/\left(R_g\,(t_{pj}+273)\right)\right]\right)\frac{B_{gorj}}{u_{pj}\rho_{Cj}f_r}. \qquad (16)$$

Уравнение теплового баланса частиц золы фракции *s*:

$$\frac{d(\beta_s u_{ps} c_{ps} t_{ps})}{dz} = -h_{convs}(t_{ps}-t_g)\frac{6\beta_s}{\delta_s\,\rho_{ashs}} - \frac{Q_{rads\to slag}}{\rho_{ashs}} - \frac{Q_{rads\to g}}{\rho_{ashs}} - \frac{Q_{reras}}{\rho_{ashs}} - c_{ps}t_{ps}\left|\frac{dB_{ps}}{dz}\right|. \qquad (17)$$

На основе систем уравнений (1)–(17) разработана программа для расчета аэродинамики, тепломассообмена и химического реагирования бурого угля в вертикальном поточном газификаторе.

Некоторые численные результаты. Проанализируем результаты расчетов трех вариантов одностадийного процесса парокислородной газификации сухой пыли бурого угля Мокрокалыгорского месторождения с $Q_н^r$ = 22,6 МДж/кг в вертикальном высокотемпературном поточном газогенераторе, работающем под давлением P_g = 4,2 МПа. Начальные условия представлены в табл. 1.

Таблица 1. Исходные данные для расчетов

Номера вариантов	B_{O_2}, кг/ч	B_{H_2O}, кг/ч	B_{N_2}, кг/ч	$B_{БУ}$, кг/ч	δ_C, мм	δ_{ash}, мм	$f_г$, м^2	$H_г$, м
I	7600	600	800	7697,4	0,1	0,08	0,49	4
II	110000	8500	11565	110983	0,1	0,08	7,065	6
III	103000	7000	11565	111261	0,1	0,08	7,065	6

В варианте I рассматривается одностадийный процесс термохимической переработки пылевидного твердого топлива в пилотной установке производительностью $B_{БУ}$ = 7697,4 кг/ч, а в II и III − в промышленных газогенераторах $B_{БУ}$ = 110983 кг/ч и $B_{БУ}$ = 111261 кг/ч. В вариантах I и II выход летучих из частиц бурого угля составляет 75%. Такой подход базируется на экспериментальных данных [5], которые показывают, что выход летучих значительно уменьшается с увеличением рабочего давления газа. На этой основе в [6, 7] получено выражение, устанавливающее связь между выходом летучих веществ и давлением газа:

$$V_{лет} = V_{лет,p=1atm}(1-0,66\ln P_g). \quad (18)$$

Из выражения (18) следует, что при давлении 4,2 МПа из частиц бурого угля выходит 75% летучих, а 25% остаются в частице и подвергаются термохимической переработке вместе с фиксированным углеродом. Ввиду отсутствия надежных опытных данных о закономерности выхода летучих веществ из бурого угля Мокрокалыгорского месторождения в зависимости от давления газа, будем считать, что на практике выделение пиролизных газов происходит в диапазоне 75-100%. По этой причине расчеты процесса газификации были выполнены при условии, что из бурого угля выделяется 100% летучих веществ (вариант III).

Характерной особенностью рассматриваемого процесса является большая величина B_{O_2}/B_{fuel} и малая − B_{H_2O}/B_{fuel}, поэтому на выходе из реактора получается синтетический газ с высоким содержанием CO. Основные трудности, возникающие при организации данного процесса, связаны с выбором соотношений B_{O_2}/B_{fuel} и B_{H_2O}/B_{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 бурого угля в рамках приведенной модели найдены оптимальные значения указанных отношений для исследуемых вариантов: вариант I – $B_{O_2}/B_{БУ}$ = 0,987, $B_{H_2O}/B_{БУ}$ = = 0,078; II – $B_{O_2}/B_{БУ}$=0,991, $B_{H_2O}/B_{БУ}$=0,0766; III – $B_{O_2}/B_{БУ}$=0,926, $B_{H_2O}/B_{БУ}$=0,063, которые обеспечивают состав синтетического газа, характерный для технологии "Shell" (рис. 2*а* и рис. 3*а*, *в*, кривые *1* – *7*; табл. 2).

Таблица 2. Результаты расчетов

Номера вариантов	CO, %	H_2, %	CO_2, %	CH_4, %	H_2O, %	SO_2, %	N_2, %	Теплота сгорания газа, МДж/м^3
I	62,07	29,85	2	0,054	1,93	0,652	3,35	11,28
II	62,07	30,1	2,05	0,041	1,63	0,654	3,36	11,3
III	55,77	32,2	3,8	0,767	2,94	0,898	3,54	11,06

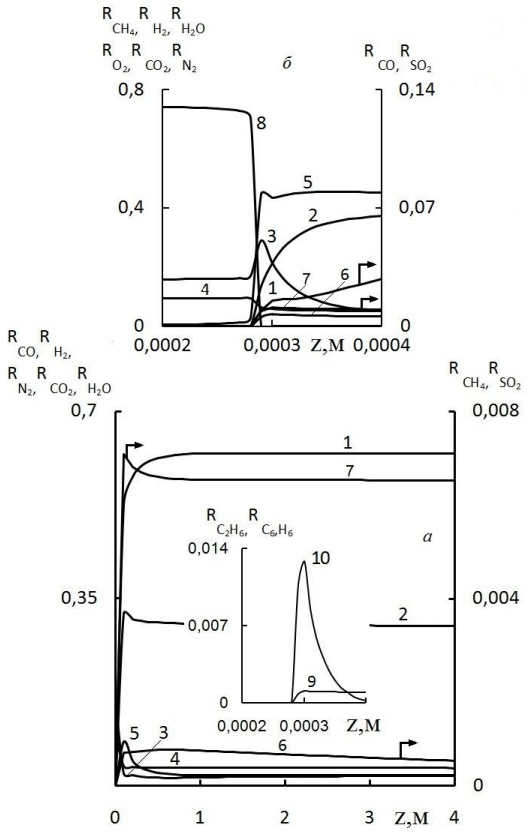


Рис. 2. Распределение объемных долей компонентов газа по высоте реактора при одноступенчатой схеме газификации для варианта I: *1 – CO; 2 – H_2; 3 – H_2O; 4 – N_2; 5 – CO_2; 6 – CH_4; 7 – SO_2; 8 – O_2; 9 – C_2H_6; 10 – C_6H_6.*

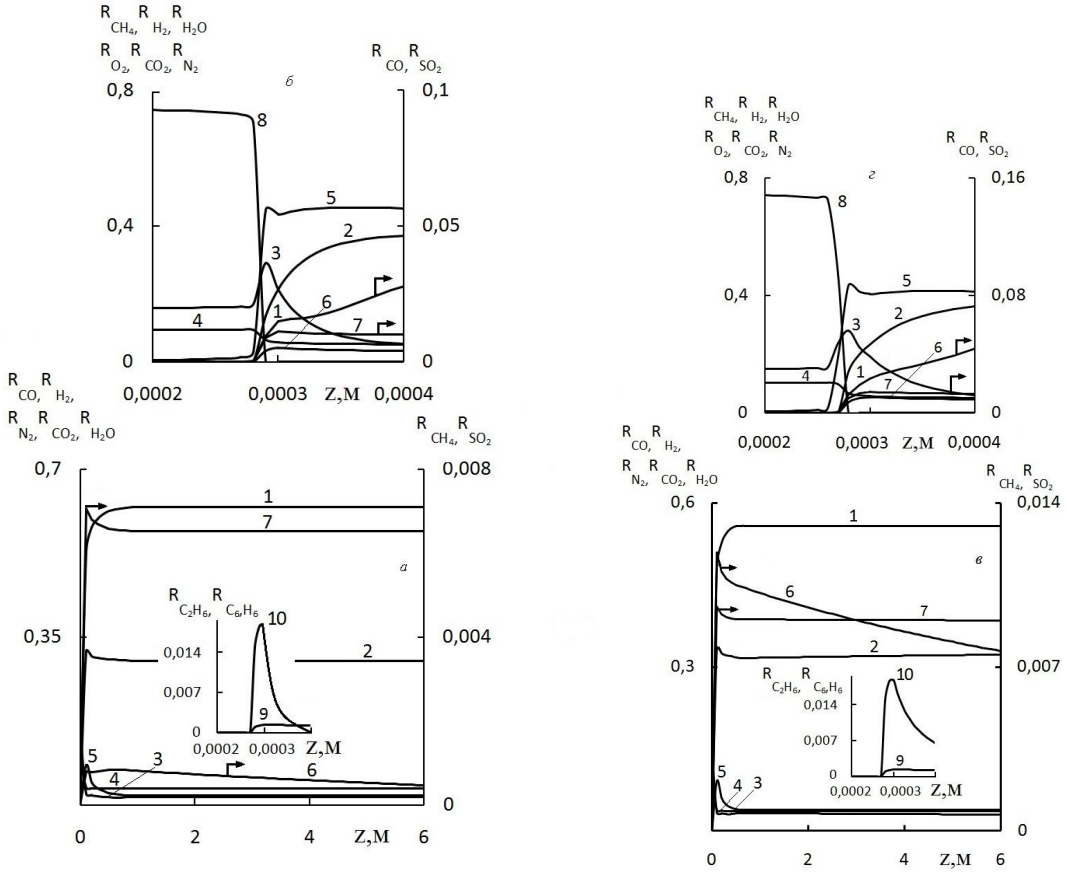


Рис. 3. Распределение объемных долей компонентов газа по высоте реактора при одноступенчатой схеме газификации для вариантов II (*а*, *б*) и III (*в*, *г*): *1 – CO; 2 – H_2; 3 – H_2O; 4 – N_2; 5 – CO_2; 6 – CH_4; 7 – SO_2; 8 – O_2; 9 – C_2H_6; 10 – C_6H_6.*

Быстрый прогрев сухой пыли бурого угля и парокислородной смеси за счет лучистой энергии шлаковой пленки в окислительной зоне, расположенной в нижней части газогенератора, влечет за собой интенсивный выход летучих веществ и их выгорание, о чем свидетельствует резкое уменьшение концентрации O_2 в газовой фазе (рис. 2*б* и рис. 3*б*, *г*, кривые *8*; рис. 4*а*, *в*, *д*). В результате содержание балласта (CO_2, H_2O) в газе и температуры несущей среды, кокса и шлака резко возрастают и достигают своих максимальных значений (рис. 2*б* и рис. 3*б*, *г*, кривые *3*, *5*; рис. 5*а*, *в*, *д*, кривые *1*, *3*, *4*). В области максимальных температур основными источниками излучения двухфазного потока на цельносварные экраны реактора являются несущая среда с максимальным содержанием трехатомных газов ($Q_{rad,g,II}$ = 1586 кДж/(с·м^2)) и частицы углерода ($Q_{rad,C,II}$ = 1265 кДж/(с·м^2)), в отличие от золы, которая поглощает радиационную энергию шлаковой пленки (рис. 5*а*, *в*, *д*, ср. кривые *2* и *4*).

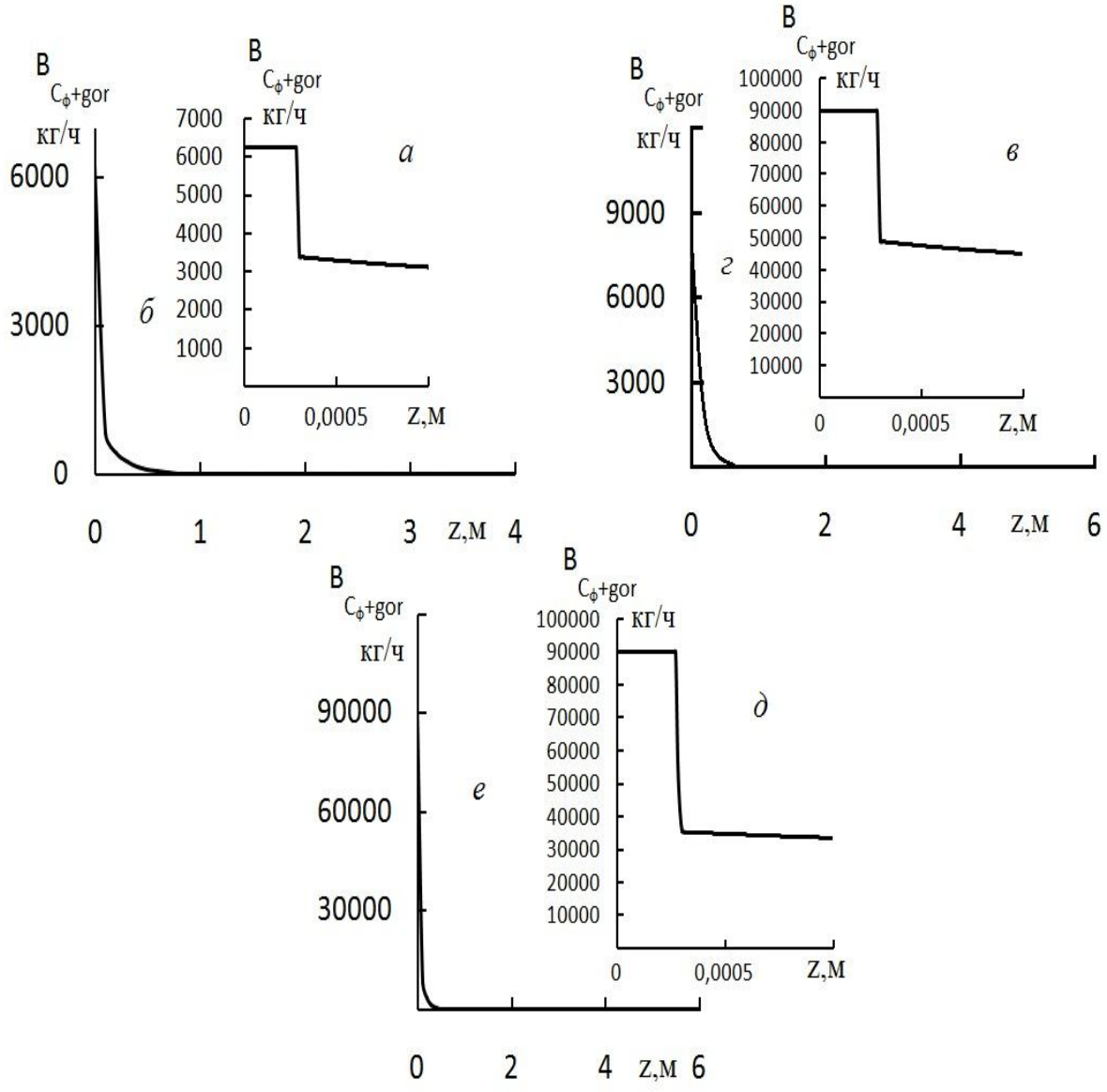


Рис. 4. Распределение расходов сухой беззольной массы (горючей) бурого угля по высоте реактора при одноступенчатой схеме газификации для вариантов I (*а*, *б*) II (*в*, *г*) и III (*д*, *е*).

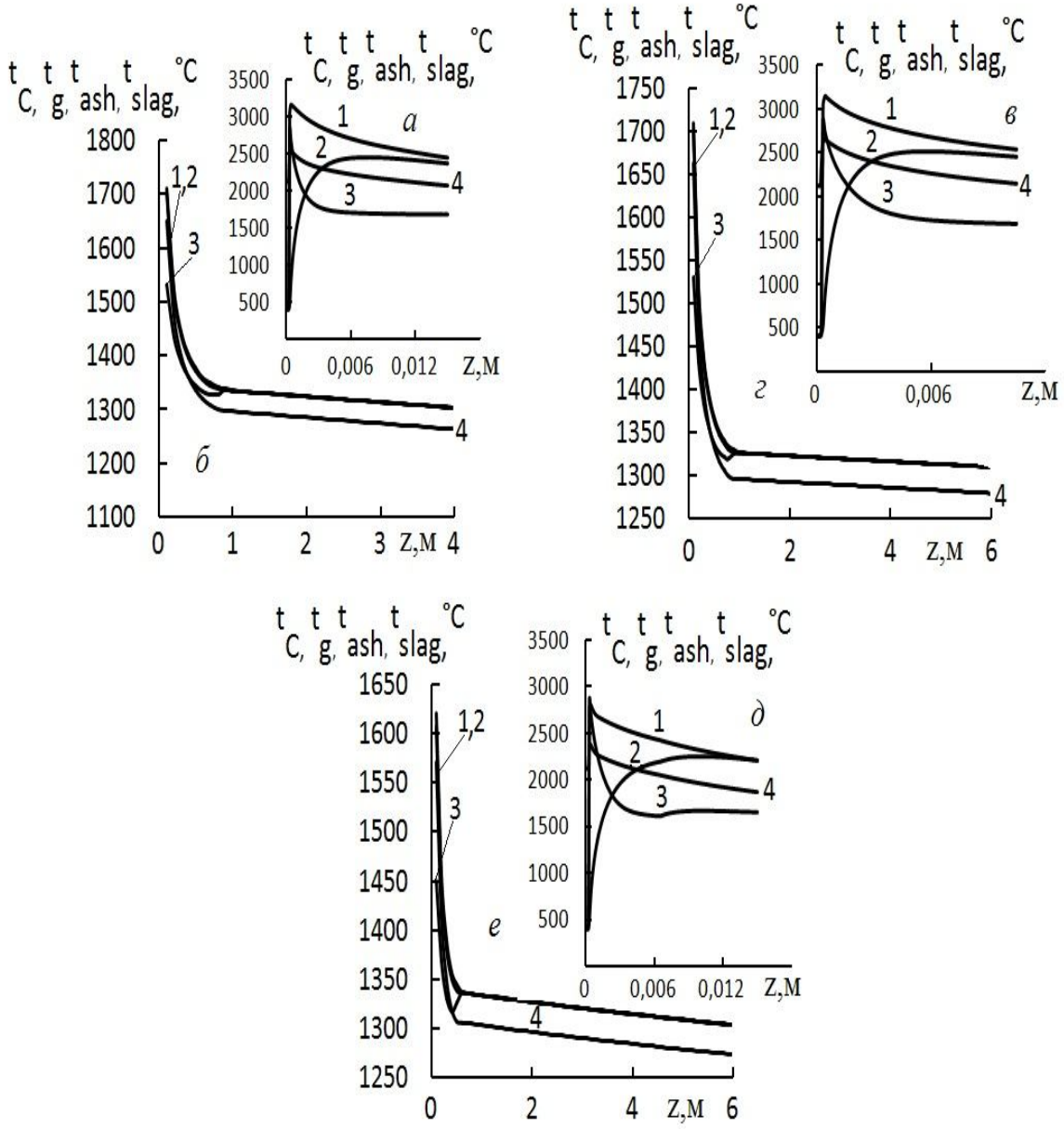


Рис. 5. Распределение температур газа (*1*), частиц золы (*2*), кокса (*3*) и шлаковой пленки (*4*) по высоте реактора при одноступенчатой схеме газификации бурого угля для вариантов I (*а*, *б*) II (*в*, *г*) и III (*д*, *е*).

Следует отметить, что на выходе из окислительной зоны в газовой смеси присутствует значительное количество водорода, объемная доля которого составляет 13-14% (рис. 2*б* и рис. 3*б*, *г*, кривые *2*). Это обусловлено тем, что скорость генерации H_2 ($CH_4 + 0{,}5O_2 = CO + 2H_2$ и $C_6H_6 + 3O_2 = 6CO + 3H_2$) превалирует над скоростью превращения водорода по реакции $H_2 + 0{,}5O_2 = H_2O$.

В восстановительной области наблюдается быстрый рост концентрации водорода в газе, в то время как содержание водяного пара резко уменьшается (рис. 2*б* и рис. 3*б*, *г*, кривые *2*, *3*). Такое поведение кривых *2* и *3* обусловлено тремя факторами. Первый из них связан с паровой конверсией летучих веществ, выделившихся в бескислородной зоне согласно гомогенным реакциям $CH_4 + H_2O = CO + 3H_2$, $C_6H_6 + 5H_2O = 5CO + 6H_2 + CH_4$ и $C_6H_6 + 6H_2O = 9H_2 + 6CO$ (рис. 2 и рис. 3, кривые *6*, *10*). Второй – со скоростью и направлением реакции водяного сдвига $CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$. Третий – с интенсивным протеканием восстановительной гетерогенной реакции $C + H_2O = CO + H_2$, о чем свидетельствует резкое уменьшение температуры и расхода углеродных частиц (рис. 4*б*, *г*, *е*; рис. 5*а*, *в*, *д*, кривые *3*).

Следует подчеркнуть, что основное количество фиксированного углерода ($\varphi_I = \varphi_{II} = 76\%$, $\varphi_{III} = 77\%$) реагирует в области максимальных тепловыделений в очень узком диапазоне $z < 0{,}1$ м (рис. 4*б*, *г*, *е*), где гетерогенные реакции $C + CO_2 = 2CO$ и $C + H_2O = CO + H_2$ протекают преимущественно в диффузионной области реагирования.

На участке $0{,}1\text{ м} < z < 1$ м, где степень конверсии фиксированного углерода во всех рассматриваемых вариантах приближается к 100% (рис. 4*б*, *г*, *е*), температуры фаз монотонно уменьшаются из-за протекания эндотермических гетерогенных реакций и лучистого теплообмена между газовзвесью и шлаковой пленкой (рис. 5*б*, *г*, *е*). В диапазоне $z > 1$ м температура газодисперсного потока слабо изменяется из-за низкого суммарного удельного теплового потока излучения на экраны газогенератора, величина которого не превышает 26-33 кДж/(с·м^2). На выходе из газификатора температуры уходящего потока газа и золы 1304-1325°С и шлаковой пленки 1264-1295°С (варианты I-III) превышают температуру жидкоплавкого состояния золы 1231°С, что создает благоприятные условия для формирования жидкого шлака по всей высоте газификатора. Так как температура шлака в газогенераторе изменяется от 2376-2653°С до 1264-1295°С, то конструкция торкрета реактора должна состоять из двух слоев. Первый − карбидокремниевая масса, которая набивается на ошипованные цельносварные экраны газификатора. В качестве второго слоя, непосредственно соприкасающегося с жидким шлаком и работающего в области высоких температур, можно использовать стабилизированную окись циркония $t_{огн} = 2500$°С, карбиды бериллия $t_{огн} > 2500$°С или титана $t_{огн} = 3100$°С в зависимости от температуры внешней поверхности обмуровки.

На выходе из газогенератора получается синтетический газ, у которого отношение объемных долей CO/H_2 составляет: вариант I – 2,08; II – 2,06; III – 1,73 (табл. 2). Интересно сопоставить результаты расчетов для вариантов II и III, отличающихся между собой количеством летучих веществ, вышедших из пылевидных частиц бурого угля (рис. 4*в* и рис. 4*д*). В варианте II отношение $B_{O_2}/B_{БУ}$ на 6,6% выше, чем в III. В результате максимальная температура несущей среды и содержание CO в генераторном газе в II оказываются на 334°С и на 10% больше, чем в варианте III соответственно (рис. 3*а*, *в*, кривые *1*; рис. 5*в*, *д*, кривые *1*). Кроме того, концентрация балласта (CO_2, H_2O) в газе в III в 1,83 раза больше, чем в варианте II (табл. 2; рис. 3*а*, *в*, кривые *3*, *5*). Исходя из этого, калорийность генераторного газа в II несколько выше, чем в варианте III (табл. 2).

Выводы. 1. Построена модель, описывающая восходящее движение, тепломассообмен и химическое реагирование полидисперсного ансамбля мелкодисперсных угольных частиц с учетом выхода во времени летучих веществ (H_2, H_2O, CO, CO_2, CH_4, C_6H_6, SO_2 и C_2H_6) и их выгорания, лучистого и конвективного теплообмена между газом и частицами, газодисперсным потоком и шлаковой пленкой, межфракционного переизлучения, тепловых эффектов гетерогенных и гомогенных реакций, сил тяжести и межфазного взаимодействия, изменения расхода зольных частиц по высоте реактора.

2. Подобраны оптимальные отношения расходов O_2/уголь и H_2O/уголь для исследуемых вариантов: вариант I – $B_{O_2}/B_{БУ} = 0{,}987$, $B_{H_2O}/B_{БУ} = 0{,}078$; II – $B_{O_2}/B_{БУ} = 0{,}991$, $B_{H_2O}/B_{БУ} = 0{,}0766$; III – $B_{O_2}/B_{БУ} = 0{,}926$, $B_{H_2O}/B_{БУ} = 0{,}063$, при которых содержание горючих в синтетическом газе ($CO + H_2$) составляет 88-92%, балласта ($CO_2 + H_2O$) − 3,7-6,7%, степень конверсии углерода − 99,9% и калорийность газа − 11,06-11,3 МДж/нм^3.

3. Показано, что температура шлака в газогенераторе изменяется от 2376-2653°С до 1264-1295°С и существенно превышает 1231°С – температуру жидкоплавкого состояния золы, что создает благоприятные условия для формирования жидкого шлака по всей внутренней поверхности газификатора. В этих условиях торкрет следует выполнять по всей высоте реактора.

4. Исходя из высокой температуры (2376-2653°С) жидкого шлака в окислительной зоне, конструкция торкрета должна быть двухслойной. Первый − карбидокремниевая масса, которая на-

бивается на ошипованные цельносварные газоплотные экраны газификатора. В качестве второго слоя можно использовать в зависимости от температуры обмуровки, непосредственно соприкасающейся с жидким шлаком, стабилизированную окись циркония $t_{огн}$ = 2500°С, карбиды бериллия $t_{огн} > 2500$°С или титана $t_{огн} = 3100$°С.

5. Основное количество фиксированного углерода ($\varphi_I = \varphi_{II} = 76\%$ и $\varphi_{III} = 77\%$) реагирует в области максимальных тепловыделений в очень узком диапазоне $z < 0{,}1$ м, где гетерогенные реакции $C + CO_2 = 2CO$ и $C + H_2O = CO + H_2$ протекают преимущественно в диффузионной области реагирования.

6. Дальнейшее развитие 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.д., и изучения их влияния на рассматриваемый процесс.

Авторы выражают глубокую признательность господину Чернявскому Н.В. за полученную от него информацию о составе летучих веществ бурого угля Мокрокалыгорского месторождения.

1. Rohman B. Modeling and numerical investigation of the process of vapor-oxygen gasification of solid fuels in a vertical flow reactor under presser // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. – 2014. – Vol. 87, No. 5. – Pp. 1103-1115.

2. Рохман Б.Б. О технологии газификации твердых топлив в вертикальном поточном реакторе под давлением // Відновлювана енергетика. – 2014. – № 2. – С. 5-15.

3. Рохман Б. Б. Моделирование тепломассообмена и химического реагирования газодисперсного потока пылевидных частиц угля в высокотемпературном газификаторе // Відновлювана енергетика. – 2016. – № 3. – С.

4. Annamalai K. and Ryan W. Interactive processes in gasufucation and combustion. 2. Isolated carbon, coal and porous char particles // Progress in energy and combustion science. 1993. Vol. 19(5). Pp. 383-446.

5. 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.

6. Anthony D. B., and Howard J. B. Coal Devolatilization and Hydrogasification // AIChE. 1976. Vol. 22. Pp. 625-656.

7. Wen C. Y., Chaung T. Z. Entrainment Coal Gasification Modeling // Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. 1979. Vol. 18, № 4. Pp. 684-695.

REFERENCES

1. Rohman B. Modeling and numerical investigation of the process of vapor-oxygen gasification of solid fuels in a vertical flow reactor under presser // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. – 2014. – Vol. 87, No. 5. – Pp. 1103-1115.

2. Рохман Б.Б. О технологии газификации твердых топлив в вертикальном поточном реакторе под давлением // Відновлювана енергетика. – 2014. – № 2. – С. 5-15.

3. Рохман Б. Б. Моделирование тепломассообмена и химического реагирования газодисперсного потока пылевидных частиц угля в высокотемпературном газификаторе // Відновлювана енергетика. – 2016. – № 3. – С.

4. Annamalai K. and Ryan W. Interactive processes in gasufucation and combustion. 2. Isolated carbon, coal and porous char particles // Progress in energy and combustion science. 1993. Vol. 19(5). Pp. 383-446.

5. 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.

6. Anthony D. B., and Howard J. B. Coal Devolatilization and Hydrogasification // AIChE. 1976. Vol. 22. Pp. 625-656.

7. Wen C. Y., Chaung T. Z. Entrainment Coal Gasification Modeling // Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. 1979. Vol. 18, № 4. Pp. 684-695.

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)

Теоретичне дослідження процесу газифікації дрібнодисперсного пилу бурого вугілля Мокрокалигірського родовища у вертикальному потоковому газифікаторі під тиском 4,2 МПа

Побудовано модель аеродинаміки, теплових і фізико-хімічних процесів у високотемпературному потоковому газифікаторі. За її допомогою отримано детальну інфор-

мацію про параметри парокисневої газифікації бурого вугілля, необхідну для конструювання пілотної та промислової установок. Показано, що рідкий шлак формується по всій висоті реактора, а його максимальна температура в окислювальній зоні досягає 2500°С, що необхідно враховувати при розробці конструкції обмурівки. Запропоновано двошаровий торкрет і обрані вогнетривкі матеріали для першого (окис цирконію, карбіди берилію і титану) і другого (карбідокремнієва маса) шарів. Підібрані оптимальні відношення витрат O_2/вугілля і H_2O/вугілля, при яких у синтез-газі $CO + H_2$ = 88-92%, CO_2 + + H_2O = 3,7-6,7%, ступінь конверсії вуглецю 99,9% і калорійність газу 11 МДж/нм^3. Бібл. 7, табл. 2, рис. 5.

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

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

Theoretical study of gasification of fine brown coal dust from Mokrokalygorsk deposit in a vertical entrained flow gasifier under pressure of 4.2 MPa

A model of aerodynamics, thermal, chemical and physical processes in the high-temperature entrained flow gasifier was constructed. With the help of this model detailed information about the parameters of steam-oxygen gasification of brown coal, necessary for the construction of pilot and industrial units was received. It is shown that the molten slag is formed over the entire height of the reactor, and a top temperature in the oxidizing zone reaches 2500 C, that should be considered when designing walling. A dual-layer shotcrete is proposed and refractory materials are chosen for the first (oxide of zirconium, beryllium, and titanium carbide) and second (SiC mass) layers. The optimum flow ratio O_2/coal and H_2O/carbon were found providing synthesis gas with $CO + H_2$ − 88−92 %, $CO_2 + H_2O$ − 3,7−6,7%, the degree of carbon conversion − 99.9% and the calorie gas − 11 MJ/Nm^3. References 7, tables 2, figures 5.

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

SYNOPSES

Effective and practical solution of the displacement problem of the expensive imported natural gas from the chemicals production (ammonia, methanol, acetic acid and so on) is its replacement by synthetic gas from steam-oxygen gasification of solid fuels (brown or black coal, bio-energy resources) in a high-temperature flow under pressure. To achieve this, a model of the dust particles gasification in high-temperature flow was constructed. With the help of this model detailed information about the Mokrokalygorsk deposit brown coal gasification parameters required for the construction of pilot and industrial units was received. It is shown that the slag temperature exceeds the liquidity of ash, so the molten slag is formed on the entire inner surface of the gasifier. To protect the screen of the gasifier from heat radiation is proposed to use a two-layer construction of shotcrete. Refractory materials are selected for each of the layers. The optimum operating parameters (flow ratio O_2/coal and H_2O/coal) were found providing the content of combustibles in the syngas − 88-92%, ballast − 3,7−6,7%, the degree of carbon conversion − 99.9% and the calorie gas − 11 MJ/Nm^3.

Стаття надійшла до редакції 13.09.16
Остаточна версія 30.10.16

