

ХІМІЧНА ІНЖЕНЕРІЯ

УДК 546.26:542.71-021.58(048.83)

ПАНОВ С. М., д.т.н., проф.; КАРВАЦЬКИЙ А. Я., д.т.н., проф., с.н.с.; ЛЕЛЕКА С. В., к.т.н.;
МІКУЛЬОНОК І. О., д.т.н., проф., с.н.с.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

СУЧАСНИЙ СТАН ПРОБЛЕМИ ОТРИМАННЯ І ВИКОРИСТАННЯ СИНТЕЗ-ГАЗУ НА ОСНОВІ РЕАКЦІЇ ГАЗИФІКАЦІЇ ВУГЛЕЦЮ. ЧАСТИНА 2. МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ФІЗИЧНИХ ПОЛІВ ПРОЦЕСУ ГАЗИФІКАЦІЇ ВУГЛЕЦЕВМІСНИХ МАТЕРІАЛІВ

Проаналізовано існуючі математичні моделі, використовувані для аналізу процесу газифікації твердого палива з метою зниження витрати природного газу в енергетичній та інших енергоємних галузях промисловості, а також зниження шкідливого впливу на довкілля за рахунок застосування синтез-газу, одержуваного в результаті газифікації. Незважаючи на значний світовий досвід у галузі моделювання процесу термічного перероблення палива на горючий газ, на тепер відсутня модель, яку можна було би застосувати безпосередньо на практиці. Тому питання розроблення адекватної математичної моделі процесу одержання й використання синтез-газу на основі реакції газифікації вуглецю залишається вкрай актуальним завданням.

Ключові слова: вуглець, паливо, газифікація, синтез-газ, моделювання.

DOI: 10.20535/2617-9741.2.2020.208051

© Панов С. М., Карвацький А. Я., Лелека С. В., Мікульонок І. О., 2020

Постановка проблеми. Раніше авторами було показано практичну можливість і доцільність часткової або повної заміни в енергетиці та енергоємних галузях промисловості природного газу на синтез-газ, одержуваний у результаті газифікації твердого палива [1].

При цьому одним з найбільш доцільних шляхів визначення конструктивно-технологічних та екобезпечних параметрів процесу газифікації, передусім у промислових масштабах, є математичне моделювання зазначеного процесу й відповідного обладнання, яке дає змогу відмовитися від затратних натурних експериментів і заощадити значні матеріально-енергетичні й людські ресурси.

Аналіз попередніх досліджень. Дослідженню процесів газифікації твердого палива і біомаси з використанням числових методів обчислювальної гідродинаміки присвячено значну кількість праць [2–14].

Однією з основних проблем зазначеного процесу є його хімізм, який істотно залежить від якісного й кількісного складу перероблюваного палива і відповідних реагентів, що беруть участь у газифікації. У результаті процес генерування синтез-газу може описуватися значною кількістю хімічних реакцій [15]. Дослідження процесу газифікації ґрунтуються на різних підходах до опису хімічної кінетики та механізмів горіння, з яких можна виділити основні два. Перший підхід передбачає детальний аналіз багатоступневих хімічних реакцій, а другий – аналіз сукупності спрощених хімічних реакцій компонентів, які роблять вирішальний внесок у кінетику процесу. Головний недолік першого підходу є потреба у потужному програмному та апаратному забезпеченні, а також можливість застосування лише в певному гідродинамічному режимі горіння. Недоліком же другого підходу є здебільшого некоректні результати числового моделювання за умови більш ніж двоступінчастих хімічних реакцій.

Математичний опис фізичних процесів під час газифікації в основному базується на двох моделях: континуально-дискретній (Euler-Lagrange) [2–7] і континуально-континуальній (Euler-Granular Multiphase) [8–14]. Перша з цих моделей надає можливість оперативно отримувати розв'язок задачі у стаціонарного режимі, але має істотні обмеження на об'ємну частку твердої фази. Друга модель не має такого обмеження,

але потребує розв'язання нестационарної задачі з кроком інтегрування за часом малого масштабу, що значно підвищує вимоги до обчислювальних ресурсів.

Метою статті є аналіз існуючих математичних моделей фізичних полів процесу газифікації вуглецевмісних матеріалів з метою визначення їхньої придатності для аналізу процесу газифікації та розроблення рекомендацій щодо визначення раціональних конструктивно-технологічних та екобезпечних параметрів процесу газифікації.

Виклад основного матеріалу.

Постановка задачі газифікації на базі Euler-Lagrange формулювання

Математичне формулювання задачі газифікації з використанням Euler-Lagrange моделі або Discrete Phase Models (DPM) для опису поведінки твердої фази розглянемо на базі статті [6].

Спочатку проаналізуємо фізичну модель газифікатора.

Газифікатори вугільної суспензії із захопленням потоком зазвичай працюють за підвищеного тиску. Вугільна суспензія розпиляється на дрібні частинки на вході в газифікатор за допомогою високошвидкісного струменю чистого кисню. Дрібні частинки вугільної суспензії прискорюються високошвидкісним струменем і миттєво нагріваються високотемпературним полум'ям. Завдяки високій температурі реакції деволатизації і газифікації вугілля проходять дуже швидко. Це забезпечує високий ступінь конверсії вуглецю в газифікаторах вугільного потоку. На основі цих характеристик під час числового моделювання приймаються певні припущення і спрощення.

Припущення і спрощення, прийняті під час математичного формулювання задачі газифікації в [6], є такими. Унаслідок того, що промислові газифікатори працюють в усталеному режимі, для математичного формулювання задачі газифікації розглядаються стаціонарні рівняння переносу. Полум'я високошвидкісного струменю представляє собою повністю розвинений турбулентний потік. Отже вважається, що модель турбулентності з двома скалярними рівняннями, а саме realizable $k-\varepsilon$ модель, придатна для опису турбулентності потоків у газифікаторах. Передбачається, що турбулентні газофазні реакції контролюються процесом турбулентного перемішування. Модель функції щільності ймовірності (probability density function (PDF)) використовується для опису взаємодії між турбулентними флуктуаціями і газофазними реакціями. Також вважається, що вугільна суспензія ідеально розпиляється, тому розподіл її частинок за розмірами такий самий, як і розподіл частинок вугілля. Метод Lagrange відстеження твердих частинок використовується для описання процесу газифікації частинок вугільної суспензії.

На підставі стаціонарного припущення рівняння переносу маси, імпульсу та ентальпії газової фази набувають вигляду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) &= S_m; \\ \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i) &= -\frac{\partial}{\partial x_j} \bar{p} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} u_i'' u_j'') + \bar{\rho} g_i + S_{\text{mom}}; \\ \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial}{\partial x_j} \tilde{h} \right) + S_{\text{rad}} + S_h, \end{aligned} \quad (1)$$

де $\bar{\cdot}$, $\tilde{\cdot}$ – означають, що величина осереднена за Reynolds і Favre, відповідно; ρ, u, h – густина, швидкість та ентальпія газової суміші, відповідно; S_m, S_{mom}, S_h – джерельні члени, що пов'язані з масою частинки, імпульсом та ентальпією, що отримують за допомогою відстеження траєкторій частинок, відповідно; S_{rad} – джерельний член, пов'язаний з тепловим випромінюванням.

Тензор в'язких напружень $\bar{\tau}_{ij}$ визначається як

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu \left[\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right],$$

де μ – динамічна в'язкість; δ_{ij} – символ Кронекера.

Невідомим членом у рівнянні (1) лишається напруження Рейнольдса $\overline{u_i''u_j''}$, що визначається з додаткових рівнянь обраної realizable $k-\varepsilon$ моделі турбулентності [1, 17]. До додаткових рівнянь моделі $k-\varepsilon$ realizable відносять рівняння для кінетичної енергії турбулентності та її дисипації:

$$-\overline{\rho u_i''u_j''} = \mu_t \left[\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \right];$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho u_i''k}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon;$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho u_i''\varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_{1\varepsilon} S_\varepsilon - \rho C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b$$

де $\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^3}{\varepsilon}$ – турбулентна в'язкість; $C_\mu, \sigma_k, \sigma_\varepsilon, C_1, C_2, C_{1\varepsilon}, C_{3\varepsilon}$ – коефіцієнти realizable $k-\varepsilon$ моделі турбулентності.

Величини G_k, G_b розраховуються за формулами [6]:

$$G_k = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2;$$

$$G_b = -g_i \frac{\mu_t}{\rho Pr_t} \frac{\partial p}{\partial x_i}.$$

Розглянемо модель турбулентних реакцій [6].

Для моделі горіння без попереднього змішування миттєвий термохімічний стан рідини вважається пов'язаним з деякими скалярними величинами, відомими як фракції суміші. Для побудови співвідношення між середніми значеннями термохімічного стану газової фази та сумішшю фракцій було прийнято функцію ймовірності PDF. Будь-які середні скаляри, зокрема температурні чи молярні частки компонентів, обчислюються за допомогою PDF

$$\overline{\varphi(\overline{T}, \overline{Y}_k, \dots)} = \int_0^1 \varphi(f, H_{\text{loss}}) P(f) df,$$

де $\overline{\varphi}$ – представляє середнє значення скаляра, а $\varphi(f, H_{\text{loss}})$ функція, що визначає співвідношення між ϕ , молярною часткою суміші f і локальною втратою теплоти H_{loss} .

Модель рівноваги прийнято для ідентифікації функції ϕ на основі принципу мінімальної енергії Gibbs. $P(f)$ – функція PDF, що визначається на основі середньої молярної частки суміші \tilde{f} та її дисперсії \tilde{f}''^2 . \tilde{f} і \tilde{f}''^2 обчислюються як:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{f}}) + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{u} \tilde{f}}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \tilde{f} \right) + S_f;$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{f}''^2}) + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{u} \tilde{f}''^2}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \tilde{f}''^2 \right) + G_g \mu_t (\nabla^2 \tilde{f}) - C_d \rho \frac{\varepsilon}{k} \tilde{f}''^2$$

де $\sigma_t = 0.85$, $C_g = 2.86$, $C_d = 2.0$; S_f – джерельний член, пов'язаний з частинками вугілля.

Молярна частка пального становить

$$f = \frac{m_{\text{fuel}}}{m_{\text{fuel}} + m_{\text{oxidizer}}}.$$

Розглянемо процеси відстеження частинок і газифікації [6]. За методом відстеження частинок Lagrangian рух частинок обчислюється за залежністю

$$\frac{du_{p,i}}{dt} = \frac{f_d}{\tau_p} (u_{g,i} - u_{p,i}) + \frac{g_i(\rho_p - \rho_g)}{\rho_p}, \quad (2)$$

де перший член у правій частині рівняння (2) – це сила опору, а другий член – сила тяжіння; t – час; $u_{p,i}$ – швидкість частинки в i -му напрямку; $\tau_p = \rho_p d_p^2 / (18\mu)$ – час аеродинамічного відклику частинки; g_i – сила тяжіння в i -му напрямку.

Коефіцієнт опору f_d є функцією числа Reynolds частинки: $f_d = 1$, коли $Re_p < 1$ і $f_d = 1 + Re_p^{0,687}$, коли $Re_p > 1$. $Re_p = \frac{u_s d_p \rho_g}{\mu_g}$, а u_s – швидкість ковзання газової фази по частинці.

Оскільки фаза частинок сильно розбавлена в більшості областей газифікатора, то в [6] взаємодії типу частинка-частинки не розглядаються. Для врахування ефектів турбулентних коливань на дисперсію частинок прийнято стохастичну модель відстеження частинок Rosin-Rammler. Коли частинки вугільної суспензії потрапляють у газифікатор, спочатку відбуваються випаровування та кипіння води. Ці два процеси прогноуються за допомогою моделі випаровування крапель і кипіння води.

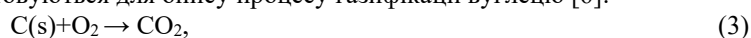
Процес видалення летких з вугілля визначається за однокроковою моделлю

$$\frac{dm_p}{dt} = -A_v \exp\left(-\frac{E_v}{RT_p}\right) (m_p - m_{pc}),$$

де m_p і m_{pc} є масою частинки і масою напівкоксу і золи в частинці; $E_v = 3.28 \cdot 10^7$ J/kmol – енергія активації; $A_v = 2.1 \cdot 10^5$ s⁻¹ – передекспоненціальний множник.

Передбачається, що в процесі видалення летких утворюються такі компоненти CO, CO₂, H₂, H₂O, CH₄, N₂ і H₂S. Склад кожного компонента базується на остаточному аналізі вугілля.

Чотири гетерогенні реакції використовуються для опису процесу газифікації вуглецю [6]:



Кінцева швидкість для кожної реакції визначається дифузною та кінетичною швидкістю хімічної реакції. Кінцева швидкість реакції i -ї реакції обчислюється за

$$R_i = \frac{R_{i,d} R_{i,k}}{R_{i,d} + R_{i,k}},$$

де R_i – кінцева швидкість реакції i -ї реакції; $R_{i,d}$ – об'ємна швидкість дифузії; $R_{i,k}$ – уявна (кінетична) швидкість хімічної реакції.

Об'ємна швидкість дифузії визначається за формулою

$$R_{i,d} = C_i \frac{[0,5(T_p + T_g)]^{0,75}}{d_p} p_i,$$

де C_i – коефіцієнт дифузії i -го реагенту, $C_i = 3 \cdot 10^{-12}$ s · K^{-0,75}; T_p – абсолютна температура частинки; T_g – абсолютна температура газової фази; d_p – діаметр частинки; p_i – парціальний тиск i -го реагенту.

Уявна швидкість гетерогенних реакцій $R_{i,k}$ виражається емпіричною залежністю, в якій враховується тиск

$$R_{i,k} = A_i \exp\left(-\frac{E_i}{RT_p}\right) \left(\frac{P_i}{10^5}\right).$$

Передекспоненціальний множник A_i і енергія активації E_i для кожної реакції (3)–(6) наведено в табл. 1.

Таблиця 1 – A_i та E_i гетерогенних реакцій газифікації [6]

	C(s)+O ₂	C(s)+CO ₂	C(s)+H ₂ O	C(s)+2H ₂
A_i , кг·м ⁻² ·с ⁻¹ ·Па ⁻ⁿ	300	2224	42.5	1.62
E_i , Дж/кмоль	1.3·10 ⁸	2.2·10 ⁸	1.42·10 ⁸	1.5·10 ⁸
n	0.65	0.6	0.4	1

Постановка задачі газифікації на базі Eulerian–Eulerian формулювання

Математичне формулювання задачі газифікації з використанням Eulerian-Eulerian наближення розглянемо на базі статті [9].

У Eulerian-Eulerian підході як газова, так і тверда фази трактуються математично як взаємо-проникаючі континууми. Основна ідея полягає у використанні керуючих рівнянь, що співвідносять зміни потоку газу-частинок у кожному обчислювальному блоці для опису властивостей газу та твердої фази. Тобто не потрібно контролювати траєкторії кожної твердої частинки. Отже, Eulerian-Eulerian підхід – це один доступний модельний підхід, за допомогою якого можна виконувати моделювання DPRS (Description of dense particulate reaction system – Опис системи реакції щільних частинок) у пілотному або промисловому масштабі. Для поділу простору, зайнятого твердим і текучим середовищем, у цьому підході вводиться поняття фазової об'ємної фракції (ФОФ). ФОФ вважається безперервними функціями простору і часу, а сума ФОФ фази газу і частинок дорівнює одиниці. Цей підхід потребує, щоб усі процеси в масштабі частинок, такі як зіткнення, сили опору, тертя та гетерогенні хімічні реакції, вирішувались в Eulerian підході.

Моделі DPRS, розроблені на основі Eulerian-Eulerian підходу, можуть включати гідродинаміку, теплопередачу та хімічні реакції разом у багатофазних системах. Для обчислення перехідної природи газотвердого потоку розв'язуються нестационарні рівняння збереження маси, імпульсу, енергії та транспортування компонентів для фаз газу та твердих частинок. Для обчислення турбулентного ефекту газової фази, а також для зменшення обчислювального навантаження використовуються різні турбулентні моделі. Гранульні рівняння напружень на основі kinetic theory of granular flow (KTGF) використовуються для моделювання конститутивних співвідношень для твердого фази. Коли тверда фаза моделюється у вигляді двох або більше континуальних фаз (різних типів або розмірів), ця модель називається Eulerian багаторідинною/багатофазною моделлю. Очевидно, що two fluid model (TFM) є основою багаторідинної моделі. Згадані керуючі рівняння та реакційні підмоделі зазвичай використовуються для розробки TFM для DPRS.

Розглянемо потік газ-частинки [9].

Консервативні рівняння для маси кожної фази мають вигляд:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) = S_{gs};$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{v}_s) = S_{sg},$$

де α, ρ, \mathbf{v} – об'ємна частка, густина і вектор швидкості, відповідно. S – джерело маси завдяки гетерогенним реакціям $S_{sg} = S_{gs}$.

Густина газової фази вважається сумішню ідеального газу

$$\rho_g = \frac{P_g}{RT \sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{w_i}},$$

де Y_i – масова частка i -ї компоненти; P_g – тиск газу.

Консервативні рівняння імпульсу для газової та твердої фаз мають вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) &= -\alpha_g \nabla P_g + \alpha_g \rho_g \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_g - \beta(\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s) + S_{gs} \mathbf{v}_s; \\ \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \mathbf{v}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s) &= -\alpha_s \nabla P_s + \alpha_s \rho_s \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_s + \beta(\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s) + S_{sg} \mathbf{v}_s \end{aligned}$$

де P_g – тиск газової фази; P_s – тиск фази частинок, який виникає завдяки зіткненню частинок; $\boldsymbol{\tau}$ – тензор напруження; β – коефіцієнт опору міжфазної поверхні газ-тверда частинка; $S_{sg} \mathbf{v}_s$ – член, що описує передачу імпульсу від твердої до газової фази.

Тензор напруження для газової та твердої фаз визначається формулами:

$$\begin{aligned} \tau_{g,ij} &= \alpha_g \mu_g \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_g \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k}; \\ \tau_{s,ij} &= \alpha_s \mu_s \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_s \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + \lambda_s \frac{\partial u_k}{\partial x_k}, \end{aligned}$$

де μ – динамічна в'язкість.

У наведених рівняннях вводяться поняття твердого тиску та в'язкості, які в теорії течії KTGF і течії тертя часто використовуються для замикання системи рівнянь.

Тиск твердих частинок дається формулою

$$P_s = \alpha_s \rho_s \Theta_s + 2\rho_s (1+e) \alpha_s^2 g_0 \Theta_s,$$

де e – коефіцієнт реституції; g_0 – функція радіального розподілу, що описує статистику просторового розташування частинок.

Для визначення g_0 використовується такий вираз

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1}.$$

Об'ємна в'язкість λ_s задається формулою

$$\lambda_s = \frac{4}{5} \alpha_s \rho_s d_s g_0 (1-e) \left(\frac{\Theta_s}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

В'язкість твердого зсуву μ_s визначається як

$$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s \rho_s d_s g_0 (1-e) \sqrt{\frac{\Theta_s}{\pi}} + \frac{10 \rho_s d_s \sqrt{\pi \Theta_s}}{96(1+e) \alpha_s g_0} \left[1 + \frac{4}{5} \alpha_s g_0 (1+e) \right]^2 + \frac{P_s \sin \phi}{\sqrt{I_{2D}}}.$$

Гранульна температура Θ_s є аналогом термодинамічної температури газу і може бути оцінена кінетичною енергією коливання частинок

$$\Theta_s = \frac{1}{3} |\mathbf{v}'_s \mathbf{v}'_s|.$$

де \mathbf{v}'_s – швидкість коливання твердих частинок.

Консервативне рівняння коливальної енергії частинки задається як

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \Theta_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{v}_s \Theta_s) \right] = -(P_s \mathbf{I} + \alpha_s \boldsymbol{\tau}_s) : \nabla \cdot \mathbf{v}_s + \nabla \cdot k_s \nabla \Theta_s - \gamma.$$

де $(P_s \mathbf{I} + \alpha_s \boldsymbol{\tau}_s) : \nabla \cdot \mathbf{v}_s$ – генерація коливальної енергії внаслідок напруження зсуву твердих частинок; $\nabla \cdot k_s \nabla \Theta$ – провідність коливальної енергії; γ – швидкість розсіювання коливальної енергії внаслідок нееластичного зіткнення твердих частинок.

Величини k_s , k_{dil} і γ визначаються за формулами:

$$k_s = \frac{2k_{dil}}{(1+e)g_0} \left[1 + \frac{6}{5}(1+e)\alpha_s g_0 \right]^2 + 2\alpha_s^2 \rho_s d_s \left(\frac{\Theta_s}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}};$$

$$k_{dil} = \frac{75\sqrt{\pi}}{384} \rho_s d_s \Theta_s^{\frac{1}{2}};$$

$$\gamma = 3(1-e^2)\alpha_s \rho_s g_0 \Theta_s \left[\frac{4}{d_s} \left(\frac{\Theta_s}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} - \nabla \cdot \mathbf{v}_s \right].$$

Різні моделі гідравлячного опору використовується для опису сили опору між газовою та твердою фазами в обміні імпульсом між ними [9]. Натепер існує чотири основні моделі гідравлячного опору: Wen-Yu модель [18], Syamlal-O'Brien модель [19], Gidaspow модель [20] і багатомасштабної мінімізація енергії (Energy Minimization Multi-Scale (EMMS)) [21]. Класична модель Gidaspow [20] широко використовується для моделювання щільного потоку газ-тверде тіло. Останнім часом модель EMMS [21] привертає багато уваги завдяки своїй здатності передбачати кластери частинок.

У праці [22] запропоновано схему на основі обміну імпульсами для обчислення сили взаємодії рідина-тверда речовина, для реалізації якої необхідні емпіричні формули для визначення сили опору. Проте ця схема поєднана лише з методом решітки Больцмана (Lattice Boltzmann Method (LBM)) [22], але не з рівняннями Navier-Stokes. З іншого боку, використовуючи LBM, у [23] отримано більш точні розв'язки для обчислення сили опору твердої частинки за різних умов.

Турбулентна поведінка потоку відіграє значну роль у DPRS, оскільки, вочевидь, це впливає на швидкість передачі теплоти та маси. Однак пряме числове моделювання (Direct Numerical Simulation (DNS)) турбулентних потоків не є вдалим вибором у більшості DPRS через потребу в значних обчислювальних ресурсах. У DPRS турбулентний потік характеризується коливанням швидкості газу та частинок. У кількох дослідженнях враховували коливання швидкості частинок [24], але в більшості випадків турбулентну модель просто враховують для потоку газу. Тверда фаза вважається ламінарною завдяки зусиллям опору щільної системи газ-частинки, що домінує в поведінці твердого потоку [25]. Існує дві основні турбулентні моделі, що використовуються в DPRS: RANS і Large Eddy Simulation (LES) моделі.

Стандартна $k-\varepsilon$ турбулентна модель RANS, яка передусім прийнята для практичних інженерних розрахунків [9].

Інтенсивність турбулентності пов'язана з ефективною в'язкістю рідини, а напруження Reynolds пропорційні середнім градієнтам швидкості через цю в'язкість. Транспортні рівняння для k і ε мають такий вигляд [9]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g k) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g k) = \nabla \cdot \alpha_g \left(\mu_{gt} + \frac{\mu_{gt}}{\sigma_k} \right) \nabla k + \alpha_g G_k - \alpha_g \rho_g \varepsilon;$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g \varepsilon) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g \varepsilon) = \nabla \cdot \alpha_g \left(\mu_{gt} + \frac{\mu_{gt}}{\sigma_k} \right) \nabla \varepsilon + \frac{\alpha_g \varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} G_k - C_{\varepsilon 2} \rho_g \varepsilon)$$

де $G_k = \boldsymbol{\tau}_g : \nabla \mathbf{v}_g$ – джерело турбулентної кінетичної енергії.

Гомогенні реакції [9].

Вивільнений летучий газ і крекінгові газові компоненти реагують з окисником, газифікувальним агентом та між собою за реакціями, такими як реакція зсуву вода-газ. Більшість гомогенних реакцій – це екзотермічні реакції, що має важливе значення для спалювання напівкоксу та підтримки температури в DPRS.

Модель хімічних реакцій [9].

Зазвичай для опису гетерогенних реакцій використовується узагальнена модель кінцевих швидкостей. Інші моделі враховують турбулентні ефекти потоку. Модель кінцевої швидкості/вихрової дисипації враховує як швидкість реакції Arrhenius, так і Eddy-dissipation. Мінімальний показник цих двох моделей приймається за результуючу швидкість реакції:

$$r_c = \min(r_a, r_e);$$

$$r_a = k_a T^z C_A^n C_B^m;$$

$$r_e = \gamma_{c,i} M_{w,i} B_1 \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left[\min_R \left(\frac{Y_R}{\gamma_{c,R} M_{w,R}} \right), B_2 \left(\frac{\sum_s Y_s}{\sum_j^N \gamma_{c,j} M_{w,j}} \right) \right]$$

де r_a – швидкість реакції основана на моделі кінцевої швидкості; r_e – швидкість реакції основана на моделі вихрової дисипації; C – молярна концентрація реагенту; n, m – показники степені; k – коефіцієнт швидкості, визначений за формулою Arrhenius.

Гетерогенні реакції [9].

У DPRS гетерогенні реакції зазвичай включають горіння, газифікацію та метанізацію. Напівкокс є твердим залишком унаслідок процесу видалення летких. Композиція напівкоксу є складною речовиною, яка може містити C, H, O, N, S тощо. Гетерогенні реакції вуглецю з газовими компонентами включають швидкість врівноваження масової дифузії окиснювальних хімічних компонентів на поверхні частинок палива з поверхневою реакцією цих компонентів з вуглецем [26].

Модель відкритого ядра (серцевини) зазвичай використовується для опису реакцій між вуглецем і газом. Результируюча швидкість реакції регулюється як дифузією компонентів газу через газовий граничний шар, так і кінетикою поверхневої реакції, яка залежить від температури, складу газового середовища та розміру та температури частинок.

Результируюча швидкість реакції напівкоксу виражається як [27]

$$r_c = \frac{6V_c}{d_s} [K_a^{-1} + K_d^{-1}]^{-1} p_i,$$

де V_c – об'єм твердої частинки напівкоксу; p_i – тиск i -го компонента газу; K_a – константа кінетичної швидкості, яка обчислюється з рівняння Arrhenius; K_d – коефіцієнт швидкості дифузії, заданий як

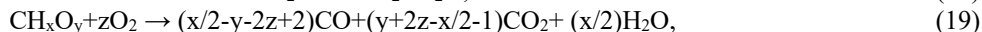
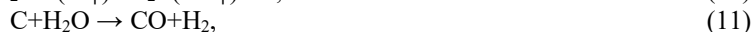
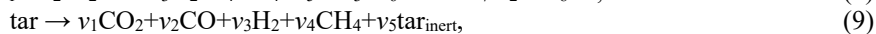
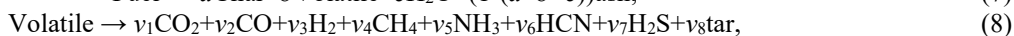
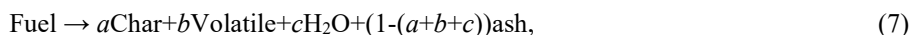
$$K_d = \frac{Sh D_{gs} M_{w,c}}{RT_s d_s},$$

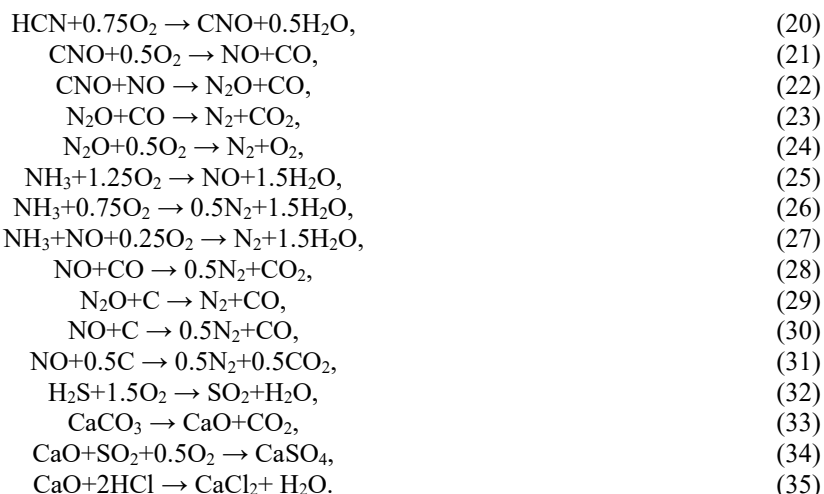
де $Sh = 2 + 0.654 Re^{\frac{1}{2}} Pr^{\frac{1}{3}}$ – число Sherwood; D_{gs} – коефіцієнт дифузії.

Згідно з моделлю усадочного ядра зола може утворювати пористий шар навколо частинки вуглецю, тому через дифузію газу крізь цей шар золи швидкість реакції також буде обмеженою.

Останнім часом деякі дослідники розробили моделі для вивчення виділення газоподібних забруднюючих речовин (NO, N₂O, SO₂, HCl) під час спалювання або газифікації в DPRS [28–30]. У цих моделях враховується кальцинація вапняку, вилучення кислотних газів кальцієм з утворенням NO та N₂O та їх відновлення. Методи опису цих гомогенних і гетерогенних реакцій здебільшого подібні до зазначених, за винятком кількох швидкостей реакцій, що враховують більше чинників [30].

Глобальні гетерогенні та гомогенні реакції, що відбуваються в DPRS, наведено нижче [9, 31–33]:





Однак у праці [9] зовсім відсутні кінетичні коефіцієнти рівняння Arrhenius до наведених глобальних реакцій (7)–(35), що не дає змогу відтворити результати числового аналізу процесу газифікації, а отже й перевірити їхні результати. Також необхідно зазначити, що в математичних постановках задач [6, 9] є певні неточності та навіть грубі помилки.

Результати числового аналізу процесу газифікації вуглецевмісних матеріалів

У статті [2] наведено результати числового моделювання полів швидкості, температури та складу газу під час газифікації вугілля в газифікаторі із захопленням потоком KIER.

Велика різниця між швидкостями потоку спостерігається біля входу і вона стрімко зменшується до низького рівня на деякій відстані від пальника. Невеликий потік рециркуляції біля стінки пальника може спостерігатися через низький тиск біля пристінної області. Це явище визначається передусім формою пальника та високою швидкістю впорскування вторинного потоку. Вектори швидкості показують, що суспензії та кисень добре змішуються.

Температура у верхній частині газифікатора (0–0,3 м) є помірною завдяки процесам поглинання теплоти в цій області, таким як нагрівання, випаровування та делатилізація частинок вугільної суспензії. Високі температури виникають у середній частині (0,3–1,2 м), де відбувається спалювання вугілля та газоподібного пального, а реакції горіння та газифікації сприяють підвищенню температури. Температура в нижньому частині газифікатора (1,20–2,05 м) поступово знижується через процеси газифікації й поглинання теплоти стінкою, що охолоджується водою.

Концентрація O_2 стрімко знижується по висоті газифікатора, внаслідок все більшого споживання O_2 на спалювання вугілля. Розподіл концентрацій CO , H_2 , CH_4 і CO_2 вказують на те, що чотири газові композиції утворюються передусім у середній частині газифікатора, при цьому в нижній частині газифікатора концентрація цих чотирьох газів залишається незмінною.

Порівняння розрахункових даних об'ємних часток газових продуктів газифікації (без врахування H_2O) з експериментальними даними наведено в табл. 2. Різниця для CO_2 , CO та H_2 перебуває в межах 5 %.

Таблиця 2 – Порівняння розрахункових та експериментальних даних [2]

	CH_4	CO_2	CO	H_2
Розрахункові дані	0.0144	0.32	0.385	0.28
Експериментальні дані	0.0035	0.34	0.42	0.23

Також досліджено вплив співвідношення O_2 /вугілля (мас./мас.) на процес газифікації, зокрема на склад синтез-газу. Результати моделювання впливу зміни співвідношенням O_2 /вугілля наведено для випадків 0,79, 0,89 та 1,01.

У статті [3] також досліджено газифікатор вугілля із захопленням потоком KIER, а також наведено результати числового аналізу фізичних полів газифікатора KIER та порівняння складу синтез-газу, отриманого за даними числового моделювання, з експериментом.

Працю [4] присвячено числовому дослідженню двоступінчастого газифікатора із захопленим потоком з опозитною подачею. Також наведено зіставлення результатів числового аналізу процесу газифікації з даними інших авторів (табл. 3).

Таблиця 3 – Порівняння значень молярних часток компонентів продуктів газифікації на виході з газифікатора [4]

Компонента	Computer Fluid Dynamics (CFD)	Aspen Plus
CO	0.392	0.378
H ₂	0.237	0.226
CO ₂	0.103	0.090
CH ₄	0.015	0.019
H ₂ S	0.007	0.007
AR	0.008	0.008
N ₂	0.008	0.008
H ₂ O	0.230	0.264

Результати Computer Fluid Dynamics CFD підходу добре узгоджуються з результатами моделювання реактора з обмеженою рівновагою Aspen Plus [4].

У статті [5] досліджено процес газифікації в газифікаторі CRIEPI. Результати моделювання розподілу температури газу та його складу добре збігаються з експериментальними даними. Тенденція температури газу та складу синтез-газу із зміною співвідношення повітря також точно прогнозуються. Розроблена методика може бути ефективно використана як інструмент для оцінки конструкцій газифікаторів і підтримки експлуатації, включаючи прогнозування даних для показників ефективності газифікації.

У статті [6] виконано числові дослідження газифікації вугільної суспензії в поетапному газифікаторі. У міру зміни системи подачі окисника температура і поле потоку в газифікаторі змінюються. Для поетапного газифікатора введення вторинного струменя посилює бурхливі процеси перемішування в газифікаторі. Більш низьке співвідношення кисню та вугілля в головному струмені стрімко зменшує область полум'я.

У праці [7] досліджено типовий подвійний газифікатор з псевдозрідженим шаром для газифікації біомаси. Оскільки циркуляція твердих тіл має вирішальне значення для підтримання процесу в системі подвійного псевдозрідженого шару, було проведено низку досліджень для визначення впливу важливих чинників на швидкість циркуляції твердих частинок, таких як діаметр частинок, твердий запас, подача пари до газифікатора і подача повітря в топку. Наведено результати числового дослідження циркуляції твердих частинок у газифікаторі.

Циркуляція твердих частинок може бути покращена за рахунок збільшення запасів твердих речовин у системі подвійного киплячого шару та збільшення гідростатичного тиску твердого шару в газифікаторі. Пара в газифікаторі також сприяє циркуляції твердих речовин, проте збільшення концентрації пари в газифікаторі спричинює більше потрапляння пари в топку, що значно знижує температуру горіння і дестабілізує процес.

У статті [8] проведено теоретичні дослідження газифікатора з псевдозрідженим шаром стоякового типу. Також наведено результати числового аналізу процесу газифікації та зіставлення з експериментальними даними.

З підвищенням температури псевдозрідженого шару концентрації CO та H₂ зростають, тоді як концентрації CO₂ та H₂O зменшуються. Збільшення співвідношення повітря/вугілля сприяє конверсії вуглецю і призводить не лише до збільшення молярної частки CO₂, а й до зменшення CO та H₂. Збільшення співвідношення пара/вугілля призводить до збільшення молярних часток CO₂ та H₂, тоді як молярна частка CO зменшується.

Працю [9] присвячено числовому дослідженню типового газифікатора з барботажним псевдозрідженим шаром. Наведено результати числового моделювання процесу газифікації та зіставлення з експериментом.

У статтях [10, 11] виконано числові дослідження процесу газифікації в газифікаторах з циркуляційним псевдозрідженим шаром стоякового типу.

Працю [12] присвячено порівнянню технологічних параметрів роботи газифікаторів VFB і CFB на підставі числового аналізу їх фізичних полів. Наведено порівняння даних моделювання з експериментом

(табл. 4), а також порівняння робочих параметрів барботуючого (BFB) та циркулюючого (CFB) газифікаторів з киплячим шаром (табл. 5).

Таблиця 4 – Порівняння даних моделювання з експериментом [11]

Параметр	Експеримент	Моделювання	Похибка, %
CO, (моль%)	14,12	14,19	0,47
CO ₂ , (моль%)	11,04	11,92	7,98
CH ₄ , (моль%)	5,78	5,94	2,63
H ₂ , (моль%)	12,47	12,76	2,37
Температура, (°C)	960,32	890,24	890,24

Таблиця 5 – Склад і температура газу на виході з газифікаторів

Параметр	BFB	CFB
H ₂ O, (моль%)	8.76	1.62
O ₂ , (моль%)	0.0	0.06
N ₂ , (моль%)	31.34	40.48
CO, (моль%)	14.44	35.48
CO ₂ , (моль%)	11.98	0.46
CH ₄ , (моль%)	4.90	0.42
H ₂ , (моль%)	12.71	15.75
NH ₃ , (моль%)	2.81	1.05
H ₂ S, (моль%)	0.68	0.25
Tag, (моль%)	12.26	4.41
Температура газу, (°C)	951.63	1405.31

За результатами виконаних у [12] досліджень зроблено такі висновки.

1) На відміну від BFB, у газифікаторі CFB тверді частинки розподіляються по всьому стояку, що приводить до більш вираженого контакту з твердим газом і тому спостерігаються кращий теплообмін і масопередача. Крім того, у випадку CFB гетерогенні реакції не обмежуються режимом псевдозрідженого шару.

2) У газифікаторі CFB спостерігається характерний серцевинно-кільцевий потік твердих частинок, тоді як газифікаторі BFB має місце осьова протитечія твердих частинок.

3) Газифікатори CFB і BFB характеризуються рівномірною температурою по всьому стояку, за винятком вихідної зони.

4) У газифікаторі CFB співвідношення $A/C=2,65$, що є дуже високим значенням і тому призводить до високої робочої температури газифікатора, яка є вищою за температуру пом'якшення золи, що є недоцільним. Отже потрібно регулювати співвідношення A/C для підтримки температури нижчої за температуру пом'якшення золи.

5) У синтез-газі з CFB найбільш помітними компонентами газу є CO (~35%), H₂ (~16%) і N₂ (~40%), тоді як у BFB – N₂ (~31%), CO (~14%), CO₂ (~12%) та H₂ (~13%).

Висновки. Аналіз математичного моделювання процесів генерування й практичного застосування синтез-газу з твердого й рідкого палива дає підставу зробити такі висновки:

1) Для числового аналізу процесів газифікації здебільшого використовуються дві моделі: континуально-дискретна (Euler-Lagrange) і континуально-континуальна (Euler-Granular Multiphase). У континуально-дискретній моделі для опису поведінки газової суміші компонентів реакцій використовується Computer Fluid Dynamics (CFD) підхід, а для твердих частинок – модель дискретної фази Discrete Phase Models (DPM) або Discrete Element Methods (DEM). У континуально-континуальній моделі для опису поведінки як газової, так псевдотвердої фаз використовується CFD підхід. При цьому для твердої фази на підставі кінетичної теорії гранульної течії записуються додаткові рівняння. Турбулентні режими газифікації описуються осередненими за Reynolds і Favre рівняннями Navier-Stokes з використанням стандартної або realizable $k-\varepsilon$ моделей.

2) Під час дослідження процесів газифікації важливою проблемою є хімічна кінетика та механізми, що відповідають за процеси горіння і можуть містити велику кількість компонентів реакцій та елементарних реакцій. Для вирішення відповідної проблеми хімічної кінетики використовуються два основних підходи: перший базується на детальних багатоступеневих хімічних реакціях, а другий – на використанні спрощених

глобальних реакцій зі значно меншою кількістю як компонентів, так і реакцій.

3) В опублікованих працях розглядається спеціалізоване обладнання для газифікації твердих вуглецевмісних матеріалів і зовсім не приділяється уваги щодо модернізації наявного промислового обладнання з метою одержання синтетичного газу. При цьому кінетика хімічних реакцій газифікації в різних працях значно різняться між собою. Передусім це стосується порядку хімічних реакцій, енергії активації, а також значень і розмірності передекспоненціальних множників кінетичного рівняння Arrhenius, що робить їх використання вельми проблематичним. Також необхідно зазначити, що в математичних постановках задач статей [6, 9] є певні неточності та навіть грубі помилки.

Перспективи подальших досліджень. Надалі передбачено розробити математичну модель процесу газифікації вуглецевмісної сировини та виконати відповідні числові дослідження діючого промислового обладнання для високотемпературного оброблення вуглецевмісної сировини з метою розроблення рекомендацій щодо визначення раціональних конструктивно-технологічних та екобезпечних параметрів процесу газифікації.

Список використаної літератури

1. Сучасний стан проблеми отримання і використання синтез-газу на основі реакції газифікації вуглецю. Частина 1. Аналіз процесу газифікації та його практичне застосування / Є. М. Панов, А. Я. Карвацький, С. В. Лелека, І. О. Мікульонок // Вісник НТУУ "КПІ". Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження. 2020. № 1(19). С. 5 – 16. DOI: 10.20535/2617-9741.1.2020.207801
2. Xiang Jun Liu, Wu Rong Zhang, Tae Jun Park. Modelling coal gasification in an entrained flow gasifier, *Combustion Theory and Modelling*. 2001. Vol. 5:4. P. 595-608. <http://dx.doi.org/10.1088/1364-7830/5/4/305>
3. Numerical study on the coal gasification characteristic in an entrained flow coal gasifier / Y. C. Choi , X. Y. Li, Y. J. Park et al. // *Fuel*. 2001. Vol. 80, No 15, P. 2193-2201 DOI: 10.1016/S0016-2361(01)00101-6
4. Modelling coal gasification with CFD and discrete phase method / S.-P. Shi, S. E. Zitney, M. Shahnam et al. // *Journal of the Energy Institute*. 2006. Vol. 79, No 4, p. 217-221. DOI: 10.1179/174602206X148865
5. Watanabe H., Otaka M. Numerical simulation of coal gasification in entrained flow coal gasifier // *Fuel*. 2006. Vol. 85, P. 1935-1943. DOI:10.1016/j.fuel.2006.02.002
6. Three-Dimensional Simulation for an Entrained Flow Coal Slurry Gasifier / Yuxin Wu, Jiansheng Zhang, Philip J. Smith et al. // *Energy Fuels* 2010. Vol. 24. P. 1156-1163 : DOI:10.1021/ef901085b
7. Hui Liu, Robert J. Cattolica, Reinhard Seiser. Operating parameter effects on the solids circulation rate in the CFD simulation of a dual fluidized-bed gasification system // *Chemical Engineering Science*. 2017. Vol. 169, No 21. P. 235-245. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2016.11.040>
8. Yawen Zhang, Fulin Lei, Yunhan Xiao. Computational fluid dynamics simulation and parametric study of coal gasification in a circulating fluidized bed reactor // *Asia-Pac. J. Chem. Eng.* 2015. Vol. 10. No 2. P. 307-317. DOI: 10.1002/apj.1878
9. CFD simulation of dense particulate reaction system: Approaches, recent advance sand applications / Wenqi Zhong, Aibing Yu, Guanwen Zhou et al. // *Chemical Engineering Science*. 2016 Vol. 140. P. 16-43. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2015.09.035>
10. Three-dimensional Eulerian-Eulerian Simulation of Coal Combustion under Air Atmosphere in a Circulating Fluidized Bed Combustor / Ying Wu, Daoyin Liu, Jiliang Ma, Xiaoping Chen // *Energy & Fuels*. 2017. Vol. 31. No 8, P. 7952-7966. DOI: 10.1021/acs.energyfuels
11. 2.5D CFD simulations of gas–solids flow in cylindrical CFB risers / Li Peng, Yingya Wu, Chengxiu Wang et al. // *Powder Technology*. 2016. Vol. 291. P. 229-243. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2015.12.018>
12. Sharma V., Agarwal V. K. Numerical simulation of coal gasification in a circulating fluidized bed gasifier // *Brazilian Journal of Chemical Engineering*. 2019. Vol. 36, No 3, P. 1289-1301. <dx.doi.org/10.1590/0104-6632.20190363s20180423>
13. Simulation of Entrained Flow Coal Gasification / E. H. Chui, A. J. Majeski, D. Y. Lu et al. // *Energy Procedia*. 2009. Vol. 1. P. 503-509 <http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2009.01.067>
14. Mathematical Model of Solid-Fuel Gasification in a Fluidized Bed / E. N. Panov, A. Ya. Karvatskii, T. B. Shilovich et al. // *Chemical and Petroleum Engineering*. 2004. Vol. 50, No 5-6, P. 312-322. <http://link.springer.com/article/10.1007/s10556-014-9900-3>
15. Anetor L., Osakue E., Odetunde Ch. Reduced Mechanism Approach of Modeling Premixed Propane-Air Mixture Using ANSYS Fluent // *Engineering Journal*. 2011. Vol. 16, No 1, P. 67-86. DOI:10.4186/ej.2012.16.1.67.

16. Карвацький А. Я. Сучасний стан проблеми теоретичного дослідження надзвукового обтікання тіл за різних конфігурацій // Вісник НТУУ "КПІ". Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження. 2015. № 1(14). С. 5–12.
17. A new $k-\varepsilon$ eddy viscosity model for high Reynolds number turbulent flows / T.-H. Shih, W. W. Liou, A. Shabbir et al. // *Comput. Fluids*, 1995. Vol. 24, P. 227-238. [https://doi.org/10.1016/0045-7930\(94\)00032-T](https://doi.org/10.1016/0045-7930(94)00032-T)
18. Wen, C. Y., Yu Y. H. *Mechanics of fluidization* // *Chemical Engineering Progress Symposium Series*. 1966. Vol. 62, P. 100-111.
19. Syamlal M., O'Brien T. Computer simulation of bubbles in a fluidized bed // *AIChE Sympos. Ser.*, 1989. P. 22-31.
20. Ding J., Gidaspow D. A bubbling fluidization model using kinetic-theory of granular flow // *AIChEJ*. 1990. Vol. 36. P. 523-538. <https://doi.org/10.1002/aic.690360404>
21. CFD simulation of concurrent-up gas-solid flow in circulating fluidized beds with structure-dependent drag coefficient / N. Yang, W. Wang, W. Ge, J. Li // *Chem. Eng. J.* 2003. Vol. 96, P. 71-80. [doi:10.1016/j.cej.2003.08.006](https://doi.org/10.1016/j.cej.2003.08.006)
22. A momentum exchange-based immersed boundary-lattice Boltzmann method for simulating incompressible viscous flows / X. D. Niu, C. Shu, Y. T. Chew, Y. Peng // *Phys. Lett.* 2006. Vol. A354, P. 173-182. [DOI:10.1016/j.physleta.2006.01.060](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2006.01.060)
23. Rong L. W., Dong K. J., Yu A. B. Lattice-Boltzmann simulation of fluid flow through packed beds of spheres: effect of particle size distribution // *Chem. Eng. Sci.* 2014. Vol. 116, P. 508-523. [DOI: 10.1016/j.ces.2014.05.025](https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.05.025)
24. Two-phase turbulence models for simulating dense gas-particle flows / L. X. Zhou, Y. Yu, F. P. Cai, Z. X. Zeng // *Particuology*. 2014. Vol. 16, P. 100-107.
25. Armstrong L. M., Gu S., Luo K. H. Effects of limestone calcination on the gasification processes in a BFB coal gasifier // *Chem. Eng. J.* 2011. Vol. 168, P. 848-860. [DOI:10.1016/j.cej.2011.01.102](https://doi.org/10.1016/j.cej.2011.01.102)
26. Experimental and numerical analysis of coffee husks biomass gasification in a fluidized bed reactor / N. Couto, V. Silva, E. Monteiro et al. // *Energy Procedia*. 2013. Vol. 36, P. 591-595. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2013.07.067>
27. Wang X. F., Jin B. S., Zhong W. Q. () Three-dimensional simulation of fluidized bed coal gasification // *Chem. Eng. Process.* 2009. Vol. 48, P. 695-705. [DOI: 10.1016/j.cep.2008.08.006](https://doi.org/10.1016/j.cep.2008.08.006)
28. Xue Q., Fox R. O. Multi-fluid CFD modeling of biomass gasification in polydisperse fluidized-bed gasifiers // *Powder Technol.* 2014. Vol. 254, P. 187-198. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2014.01.025>
29. Yu, G.B., Chen, J.H., Li, J.R., Hu, T., Wang, S., Lu, H.L. (2014) Analysis of SO₂ and NO_x emissions using two-fluid method coupled with eddy dissipation concept reaction sub model in circulating fluidized bed combustors, *Energy Fuels*, 28, P. 2227-2235. [DOI: 10.1021/ef402341p](https://doi.org/10.1021/ef402341p)
30. Two-dimensional computational fluid dynamics simulation of nitrogen and sulfur oxides emissions in a circulating fluidized bed combustor / W. Zhou, C. S. Zhao, L. B. Duan et al. // *Chem. Eng. J.* 2011a. Vol. 173, P. 564-573. [DOI:10.1016/j.cej.2011.07.083](https://doi.org/10.1016/j.cej.2011.07.083)
31. Modelling of gaseous pollutants emissions in circulating fluidized bed combustion of municipal refuse / E. Desroches-Ducarne, J. C. Dolignier, E. Marty et al. // *Fuel*. 1998. Vol. 77, P. 1399-1410. [https://doi.org/10.1016/S0016-2361\(98\)00060-X](https://doi.org/10.1016/S0016-2361(98)00060-X)
32. Gomez-Barea A., Leckner B. Modeling of biomass gasification in fluidized bed // *Progress Energy Combust. Sci.* 2010. Vol. 36, P. 444-509. [DOI: 10.1016/j.pecs.2009.12.002](https://doi.org/10.1016/j.pecs.2009.12.002)
33. Three-dimensional Eulerian-Eulerian modeling of gaseous pollutant emissions from circulating fluidized bed combustors / J. Xie, W. Q. Zhong, B. S. Jin et al. // *Energy Fuels* 2014b. Vol. 28, P. 5523-5533.

Надійшла до редакції 15.04.2020

Panov Ye. M., Karvatskii A. Ya., Leleka S. V., Mikulionok I. O.

THE CURRENT STATE OF THE PROBLEM OF MANUFACTURE AND USING SYNTHESIS GAS BASED ON THE CARBON GASIFICATION REACTION. PART 2. MATHEMATICAL MODELS OF THE PHYSICAL FIELDS OF THE CARBON-CONTAINING MATERIALS GASIFICATION

The first part of the article showed the practical feasibility and feasibility of partial or full replacement in the energy and energy-intensive industries of natural gas for synthesis gas resulting from the gasification of solid fuels. At the

same time, one of the most appropriate ways to determine the structural, technological and environmentally friendly parameters of the gasification process, especially on an industrial scale, is the mathematical modeling of this process and related equipment. This allows you to abandon the costly field experiments and save significant material, energy and human resources.

An analysis of mathematical modeling of the processes of generation and practical use of synthesis gas from solid and liquid fuels showed that for the numerical analysis of gasification processes, for the most part, two models are used: continuum-discrete (Euler-Lagrange) and continuum-continuum (Euler-granular Multiphase). In the continuous-discrete model, the Computer Fluid Dynamics (CFD) approach is used to describe the behavior of the gas mixture of reaction components, and for solid particles, the Discrete Phase Models (DPM) or Discrete Element Methods (DEM) are used.

In the continuum-continuum model, the CFD approach is used to describe the behavior of both the gas and pseudo-solid phases. Moreover, for the solid phase, on the basis of the kinetic theory of granular flow, additional equations are written. Turbulent gasification modes are described by the Navier-Stokes equations averaged over Reynolds and Favre using standard or realizable $k-\varepsilon$ models.

It is also shown that in the study of gasification processes, an important problem is chemical kinetics and mechanisms that are responsible for combustion processes and can contain a large number of reaction components and elementary reactions. To solve the corresponding problem of chemical kinetics, two main approaches are used: the first is based on detailed multi-stage chemical reactions, and the second is based on the use of simplified global reactions with a significantly smaller number of both components and reactions.

In the published works, specialized equipment for the gasification of solid carbon-containing materials is considered and no attention is given to the modernization of existing industrial equipment in order to produce synthetic gas. At the same time, the kinetics of chemical gasification reactions in different studies differs significantly. First of all, this concerns the order of chemical reactions, activation energy, as well as the values and dimensions of the preexponential factors of the kinetic equation Arrhenius. It is also shown that in a number of existing mathematical formulations of problems there are certain inaccuracies and even gross errors. All this makes the direct use of existing models very problematic.

Keywords: carbon, fuel, gasification, synthetic gas, modeling.

References

1. Panov, Ye. M., Karvatskii, A. Ya., Leleka, S. V., Mikulionok, I. O. (2020), Suchasnyj stan problemy otrymannja i vykorystannja syntezy-ghazu na osnovi reakciji ghazyfikaciji vughleccju. Chastyna 1. Analiz procesu ghazyfikaciji ta jogho praktychne zastosuvannja [The current state of the problem of manufacture and using synthesis gas based on the carbon gasification reaction. Part 1. Analysis of the gasification process and its practical application], *Bulletin of National Technical University of Ukraine «Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute»*, Series «Chemical engineering, ecology and resource saving» [Visnyk Natsionalnoho tekhnichnoho universytetu Ukrainy «Kyivskyi politekhnichniy instytut imeni Ihoria Sikorskoho», Seriiia «Khimichna inzheneriia, ekolohiia ta resursozberezhennia»], no 1(19), pp. 5–16, DOI: 10.20535/2617-9741.1.2020.207801.
2. Xiang Jun Liu, Wu Rong Zhang, Tae Jun Park (2001). Modelling coal gasification in an entrained flow gasifier, *Combustion Theory and Modelling*, vol. 5:4, pp. 595-608 <http://dx.doi.org/10.1088/1364-7830/5/4/305>
3. Choi, Y.C., Li, X.Y., Park, Y.J., Kim, J.H., Lee, J.G. (2001) Numerical study on the coal gasification characteristic in an ettrained flow coal gasifier, *Fuel*, vol. 80, no 15, pp. 2193-2201 DOI: 10.1016/S0016-2361(01)00101-6.
4. Shi, S.-P., Zitney, S. E., Shahnam, M., Syamlal, M., Rogers, W. A. (2006). Modelling coal gasification with CFD and discrete phase method, *Journal of the Energy Institute*, vol. 79, No 4, pp. 217-221. DOI 10.1179/174602206X148865
5. Watanabe, H., Otaka, M. (2006) Numerical simulation of coal gasification in entrained flow coal gasifier, *Fuel*, vol. 85, pp. 1935-1943. doi:10.1016/j.fuel.2006.02.002
6. Yuxin Wu, Jiansheng Zhang, Smith, Ph. J., Hai Zhang, Reid, Ch., Junfu Lv, Guangxi Yue (2010). Three-Dimensional Simulation for an Entrained Flow Coal Slurry Gasifier, *Energy Fuels*, vol. 24, pp. 1156-1163 : DOI:10.1021/ef901085b
7. Hui Liu, Cattolica, R. J., Seiser, R. (2017) Operating parameter effects on the solids circulation rate in the CFD

- simulation of a dual fluidized-bed gasification system, *Chemical Engineering Science*, vol. 169, no 21, pp. 235-245 <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2016.11.040> 111
8. Yawen Zhang, Fulin Lei, Yunhan Xiao (2015). Computational fluid dynamics simulation and parametric study of coal gasification in a circulating fluidized bed reactor, *Asia-Pac. J. Chem. Eng.*, vol. 10, no 2, pp. 307-317. DOI: 10.1002/apj.1878
 9. Wenqi Zhong, Aibing Yu, Guanwen Zhou, Jun Xie, Hao Zhang (2016). CFD simulation of dense particulate reaction system: Approaches, recent advance sand applications, *Chemical Engineering Science*, vol. 140, pp. 16-43. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2015.09.035>
 10. Ying Wu, Daoyin Liu, Jiliang Ma, and Xiaoping Chen (2017). Three-dimensional Eulerian-Eulerian Simulation of Coal Combustion under Air Atmosphere in a Circulating Fluidized Bed Combustor, *Energy & Fuels*, vol. 31, no 8, pp. 7952-7966. DOI: 10.1021/acs.energyfuels
 11. Li Peng, Yingya Wu, Chengxiu Wang, Jinsen Gao, Xingying Lan (2016). 2.5D CFD simulations of gas–solids flow in cylindrical CFB risers, *Powder Technology*, vol. 291, pp. 229-243. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2015.12.018>
 12. Vikrant Sharma, Vijay K. Agarwal (2019). Numerical simulation of coal gasification in a circulating fluidized bed gasifier, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, vol. 36, No 3, pp. 1289-1301. <dx.doi.org/10.1590/0104-6632.20190363s20180423>.
 13. Chui, E. H., Majeski, A. J., Lu, D. Y., Hughes, R., Gao, H., McCalden, D. J., Anthony, E. J. (2009). Simulation of Entrained Flow Coal Gasification, *Energy Procedia*, Vol. 1, pp. 503-509. <http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2009.01.067>
 14. Panov, E. N., Karvatskii, A. Ya., Shilovich, T. B., Lazarev, T. V., Moroz, A. S. (2014). Mathematical Model of Solid-Fuel Gasification in a Fluidized Bed, *Chemical and Petroleum Engineering*, vol. 50, No 5-6, pp. 312-322. <http://link.springer.com/article/10.1007/s10556-014-9900-3>
 15. Anetor, L., Osakue, E., Odetunde, Ch. (2011). Reduced Mechanism Approach of Modeling Premixed Propane-Air Mixture Using ANSYS Fluent, *Engineering Journal*, vol. 16, No 1, pp. 67-86. DOI:10.4186/ej.2012.16.1.67
 16. Karvatskii, A. Ya. (2015). Suchasnyi stan problemy teoretychnoho doslidzhennia nalzvukovoho obtikannia til za riznykh konfiguratsii [The current state of the problem of the theoretical study of supersonic flow around bodies with various configurations], *Visnyk NTUU "KPI". Khimichna inzheneriia, ekologiia ta resursozberezhennia*, No 1(14), pp. 5–12.
 17. Shih, T.-H., Liou, W. W., Shabbir, A., Yang, Z., Zhu, J. (1995). A new $k-\epsilon$ eddy viscosity model for high Reynolds number turbulent flows, *Comput. Fluids*, vol. 24, pp. 227-238. [https://doi.org/10.1016/0045-7930\(94\)00032-T](https://doi.org/10.1016/0045-7930(94)00032-T)
 18. Wen, C. Y., Yu, Y. H. (1966). Mechanics of fluidization, *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, vol. 62, pp. 100-111.
 19. Syamlal, M., O'Brien, T. (1989). Computer simulation of bubbles in a fluidized bed, *AIChE Sympos. Ser.*, pp. 22-31.
 20. Ding, J., Gidaspo, D. (1990). A bubbling fluidization model using kinetic-theory of granular flow. *AIChEJ*, vol. 36, pp. 523-538. <https://doi.org/10.1002/aic.690360404>
 21. Yang, N., Wang, W., Ge, W., Li, J. (2003). CFD simulation of concurrent-up gas-solid flow in circulating fluidized beds with structure-dependent drag coefficient, *Chem. Eng. J.*, vol. 96, pp. 71-80. <doi:10.1016/j.cej.2003.08.006>
 22. Niu, X. D., Shu, C., Chew, Y. T., Peng, Y. (2006). A momentum exchange-based immersed boundary-lattice Boltzmann method for simulating incompressible viscous flows, *Phys. Lett.*, vol. A354, pp. 173-182. DOI:10.1016/j.physleta.2006.01.060
 23. Rong, L. W., Dong, K. J., Yu, A. B. (2014). Lattice-Boltzmann simulation of fluid flow through packed beds of spheres: effect of particle size distribution, *Chem. Eng. Sci.*, vol. 116, pp. 508-523. DOI: 10.1016/j.ces.2014.05.025
 24. Zhou, L. X., Yu, Y., Cai, F. P., Zeng, Z. X. (2014). Two-phase turbulence models for simulating dense gas-particle flows, *Particuology*, vol. 16, pp. 100-107.
 25. Armstrong, L. M., Gu, S., Luo, K. H. (2011). Effects of limestone calcination on the gasification processes in a BFB coal gasifier, *Chem. Eng. J.*, vol. 168, pp. 848-860. DOI:10.1016/j.cej.2011.01.102
 26. Couto, N., Silva, V., Monteiro, E., Brito, P., Rouboa, A. (2013). Experimental and numerical analysis of coffee husks biomass gasification in a fluidized bed reactor, *Energy Procedia*, vol. 36, pp. 591-595.

<https://doi.org/10.1016/j.egypro.2013.07.067>

27. Wang, X. F., Jin, B. S., Zhong, W. Q. (2009). Three-dimensional simulation of fluidized bed coal gasification, *Chem. Eng. Process*, vol. 48, pp. 695-705. DOI: 10.1016/j.ccep.2008.08.006
28. Xue, Q., Fox, R. O. (2014). Multi-fluid CFD modeling of biomass gasification in polydisperse fluidized-bed gasifiers, *Powder Technol.*, vol. 254, pp. 187-198. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2014.01.025>
29. Yu, G. B., Chen, J. H., Li, J. R., Hu, T., Wang, S., Lu, H. L. (2014). Analysis of SO₂ and NO_x emissions using two-fluid method coupled with eddy dissipation concept reaction sub model in circulating fluidized bed combustors, *Energy Fuels*, vol. 28, pp. 2227-2235. DOI: 10.1021/ef402341p
30. Zhou, W., Zhao, C. S., Duan, L. B., Chen, X. P., Liang, C. (2011a). Two-dimensional computational fluid dynamics simulation of nitrogen and sulfur oxides emissions in a circulating fluidized bed combustor, *Chem. Eng. J.*, vol. 173, pp. 564-573. DOI:10.1016/j.ccej.2011.07.083.
31. Desroches-Ducarne, E., Dolignier, J. C., Marty, E., Martin, G., Delfosse, L. (1998). Modelling of gaseous pollutants emissions in circulating fluidized bed combustion of municipal refuse, *Fuel*, col. 77, pp. 1399-1410. [https://doi.org/10.1016/S0016-2361\(98\)00060-X](https://doi.org/10.1016/S0016-2361(98)00060-X).
32. Gomez-Barea, A., Leckner, B. (2010). Modeling of biomass gasification in fluidized bed, *Progress Energy Combust. Sci.*, vol. 36, pp. 444-509. DOI: 10.1016/j.pecs.2009.12.002.
33. Xie, J., Zhong, W. Q., Jin, B. S., Shao, Y. J., Liu, H. (2014b). Three-dimensional Eulerian-Eulerian modeling of gaseous pollutant emissions from circulating fluidized bed combustors, *Energy Fuels*, vol. 28, pp. 5523-5533.

УДК 66.041.491

ЩЕРБИНА В. Ю., д.т.н., професор; ШВАЧКО Д. Г., магістр, асистент
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ НЕСТАЦІОНАРНОГО ТЕПЛООБМІНУ В ФУТЕРІВЦІ ОБЕРТОВИХ АГРЕГАТІВ

Збільшення стійкості вогнетривкої футерівки обертових теплових агрегатах в є важливим заходом при підвищенні ефективності їх використання. В роботі виконаний розрахунок температурного режиму в футерівці заповненої матеріалом з використовується диференціального рівняння нестационарної теплопровідності. Числовий розрахунок здійснюється з використанням методу скінчених різниць по явній схемі. Для візуалізації і виведення графічної інформації використовуються програми на мові AutoLisp в середовищі AutoCAD. Рух матеріалу моделюється зміною значення коефіцієнту теплоїддачі до внутрішньої поверхні футерівки в місті його розташування, враховуючи його переміщення.

В процесі роботи обертової печі її футерівка витримує циклічну зміну температур. Так її внутрішня поверхня, при потраплянні під шар матеріалу, охолоджується до 1246 °С, в порівнянні з початковою 1465 °С. При цьому інтенсивна зміна температур, особливо в поверхневих шарах футерівки сприяє виникненню найбільших градієнтів, що викликає значні термічні напруження і в реалі може призвести до руйнування футерівки. Глибина шару проникнення змінної температури в футерівку, визначена по амплітуді коливань 0.01, знаходиться до глибини 70 мм, при загальній товщині футерівки 230 мм.

Результатом проведених досліджень є розробка математичної моделі, алгоритмів та програмного забезпечення для розрахунку і вивчення процесу нестационарного теплообміну в футерівці обертових агрегатів. Визначено еволюцію і розподіл температур та теплових потоків в футерівці. Отримані значення інтенсивності теплового потоку дозволяє характеризувати вплив технологічних параметрів роботи агрегату на температурний та тепловий режим футерівки та обертової печі в цілому.

Результати розрахунку також приведені в електронному додатку до статті у вигляді відео файлів.

Ключові слова: обертова піч, тепловий потік, теплопередача, вогнетривка футерівка, температура, амплітуда

DOI: 10.20535/2617-9741.2.2020.208052

© Щербина В. Ю., Швачко Д. Г., 2020.