

УДК 662.7; 544.45

Математическое моделирование процесса ступенчатой пылеугольной газификации*

И.Г. ДОНСКОЙ¹, Д.А. СВИЩЕВ², В.А. ШАМАНСКИЙ³, А.Н. КОЗЛОВ⁴

¹ 664033, РФ, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, кандидат технических наук, научный сотрудник. E-mail: donskey.chem@mail.ru

² 664033, РФ, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, ведущий инженер. E-mail: woodgas@ya.ru

³ 664033, РФ, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, кандидат химических наук, заведующий лабораторией. E-mail: vita@isem.sei.irk.ru

⁴ 664033, РФ, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, младший научный сотрудник. E-mail: kozlov@isem.sei.irk.ru

Проектирование новых парогазовых установок с газификацией угля требует развития инструментов для расчета параметров процесса конверсии топлива. В частности, для выбора оптимальных параметров установки требуется знать состав газа и его выходную температуру. Для расчета этих величин необходимы соответствующие математические модели, учитывающие физико-химические особенности процесса. В статье рассматривается математическая модель процесса газификации угля в потоке. Процесс, аналогичный предложенному фирмой Mitsubishi Heavy Industries (МНН), включает две ступени превращений топлива. На первой ступени подается топливо и окислитель в соотношении, достаточном для полного сгорания. На вторую ступень подается топливо и продукты сгорания с первой ступени. Организация ступенчатого процесса позволяет снизить температуру генераторного газа на выходе, а рециркуляция твердого остатка второй ступень на сжигание в первую ступень позволяет использовать низкие концентрации кислорода в дутье. Построенная модель пространственно одномерная, учитывает рециркуляцию недожога и отдельную подачу топлива на разной высоте реактора. Скорость гетерогенных превращений рассчитывается с использованием диффузионно-кинетической теории горения твердого топлива, состав газа в каждый момент принимается локально равновесным. Распределение температур рассчитывается с применением разностной схемы с расщеплением по физическим процессам. Разработан алгоритм для численных расчетов. Проведена верификация математической модели с применением экспериментальных данных. С помощью модели рассчитан ряд режимов, которые оказались оптимальными в результате термодинамического анализа процесса газификации. Получены границы применимости термодинамических оценок эффективности режимов работы ступенчатого газогенератора.

* Статья получена 20 августа 2014 г.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 14-08-01226А.

Ключевые слова: газификация угольной пыли в потоке, ступенчатая газификация, воздушное дутье, математическое моделирование, диффузионная кинетика, тепломассоперенос, термодинамико-кинетические модели, химический КПД

DOI: 10.17212/1814-1196-2015-1-231-245

ВВЕДЕНИЕ

Разработка новых схем ПГУ с внутрицикловой газификацией твердого топлива (ПГУ-ВЦГ) связана с перспективами повышения эффективности использования угля для нужд энергетики [1]. Оценки показывают, что ПГУ-ВЦГ могут дать значительный прирост КПД переработки угля [2]. Использование генераторного газа для сжигания вместо углеводородов позволит сэкономить значительные объемы ценного химического сырья. Возможно создание установок широкого предназначения с производством тепла, электроэнергии и ряда продуктов, которые могут найти применение в химической промышленности (синтез-газ, водород, сера) [3]. Выбросы некоторых вредных веществ, характерных для сжигания угля (таких как оксиды серы и азота), становятся намного меньше.

В настоящее время в мире реализовано множество проектов ПГУ-ВЦГ, некоторые из которых успешно действуют и по сей день. Тем не менее существует ряд проблем, которые замедляют развитие и внедрение подобных установок. Одной из них является организация процесса достаточно полной конверсии угля. Образование недожога в процессах газификации связано, в первую очередь, с нехваткой окислителя, которая необходима для получения горючего газа. Эта проблема решается двумя путями: либо с применением многократной рециркуляции твердого остатка процесса газификации (естественной, как, например, в реакторах кипящего слоя, или со специальными системами возврата), либо с использованием дутья с повышенной концентрацией кислорода (за счет повышения скорости конверсии с температурой и плавления золы).

В настоящей работе рассматривается один из вариантов схемы пылеугольного газогенератора с рециркуляцией твердого остатка. Главным преимуществом такого типа реакторов является возможность работы на воздушном (или слабообогащенном) дутье, что освобождает от необходимости применения дорогих воздухоразделительных установок. Как показывают термодинамические оценки [4], при оптимальной организации процесса различие в КПД между схемами ПГУ-ВЦГ с обогащенным и воздушным дутьем составляет чуть более 1 %. Поэтому главной задачей становится поиск условий проведения процесса, при которых на выходе из реактора достигается близость состава газа к термодинамически равновесному. Для предварительной оценки эффективности ПГУ-ВЦГ с подобным газогенератором требуется математическая модель, которая позволит учесть кинетические факторы и выделить реализуемые на практике режимы.

Представленная статья посвящена разработке модели ступенчатого пылеугольного газогенератора, аналогичного процессу, разработанному Mitsubishi Heavy Industries (МНИ) [5]. Это один из вариантов совмещения авто- и аллотермических процессов в рамках одной установки. Схема процесса представлена на рис. 1. Такая организация потоков позволяет получить кало-

рийный газ и более полно использовать теплоту сгорания угля на стадии аллотермической газификации.

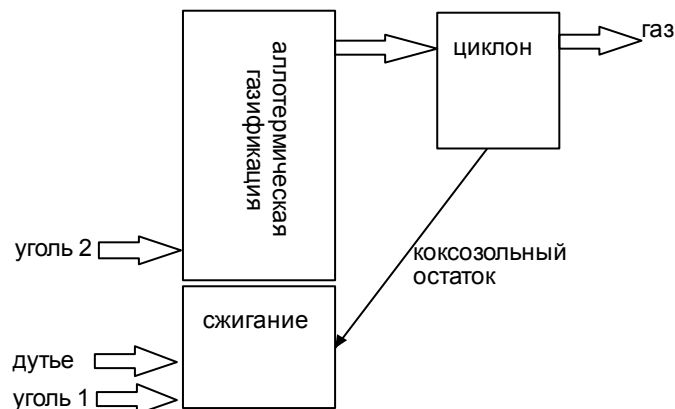


Рис. 1. Схема процесса МНІ

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

В литературе можно найти математические модели ступенчатых поточных процессов, в том числе в приложении к схеме МНІ, созданные на основе CFD-кодов [6–9]. Их недостатки заключаются в первую очередь в громоздкости моделей и больших вычислительных затратах. В настоящей работе модель строится на основе более простых исходных положений (в частности, процесс считается пространственно одномерным) аналогично [10], однако имеется ряд отличий от этой работы (равновесная аппроксимация состава газа и расщепление задачи тепломассопереноса с химическими реакциями). Такое упрощение не позволяет оценивать влияние некоторых гидродинамических эффектов на работу газогенератора, однако существенно упрощает вычисления и позволяет проанализировать влияние различных параметров в широком диапазоне за обозримое время.

1. СТРУКТУРА МОДЕЛИ

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

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

Уравнение теплового баланса для угольной частицы записывается следующим образом:

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

Здесь c_p – удельная теплоемкость топлива, Дж/кг/К; m – масса частицы, кг; T – температура частицы, К; ε – степень черноты частицы; σ – постоянная Стефана-Больцмана, Вт/м²/К⁴; S – площадь поверхности частицы, м²; T_w – температура окружающей среды, К; α – коэффициент конвективного теплопереноса, Вт/м²/К; Q_w – теплота испарения влаги, Вт; Q_r – теплота химических превращений, Вт.

Скорость сушки вычисляется по формуле

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

Здесь j_w – поток влаги, кг/с; β – коэффициент массообмена, м/с; C_{H_2O} – концентрация водяных паров, кг/м³.

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

$$Nu = Sh = 2 + 0.16 Re^{\frac{2}{3}}.$$

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

Скорость пиролиза описывается кинетическим уравнением первого порядка:

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

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

Скорость реагирования топлива с газообразными окислителями записывается следующим образом:

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

где m_C – масса топлива, кг; k_{eff} – эффективная константа скорости гетерогенной реакции, м/с; S – площадь поверхности топлива, м²; $C_{\text{ок}}$ – концентрация окислителя, кг/м³.

Эффективная константа скорости выражается через кинетические и массообменные коэффициенты (в предположении, что кинетический порядок реакции по окислителю равен единице) следующим образом [11]:

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

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

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

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

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

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

Схему тепловых потоков в поточном реакторе можно представить следующим образом (рис. 2). Это одномерная по пространственным координатам схема, в которой рассматривается теплообмен между топливом, газом и стенкой. На этой схеме – графе – тепловые потоки показаны в виде дуг между вершинами графа. Эти потоки включают кондуктивный (в том числе за счет турбулентного переноса), конвективный и лучистый теплообмен. В стационарном состоянии сумма потоков в каждой вершине должна равняться нулю. Таким образом, для расчета режимов работы газогенератора необходимо составить и решить систему уравнений баланса теплоты в каждой вершине графа [12].

Поскольку, как уже указывалось выше, процессы переноса и химическая реакция тесно связаны, необходимо совместное решение уравнений диффузионной кинетики и теплопереноса. В настоящей работе эти уравнения решаются по отдельности на разных стадиях одной итеративной процедуры. Предлагается следующий алгоритм (примененный для расчета газификации в плотном слое [13, 14]):

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

После завершения этих стадий расчет повторяется: химические превращения рассчитываются при уточненном температурном профиле, затем температурный профиль корректируется с учетом химических превращений (рис. 3). Такой подход (расщепление по физическим процессам) является известным способом решения задач горения, возникающих на практике [15, 16].

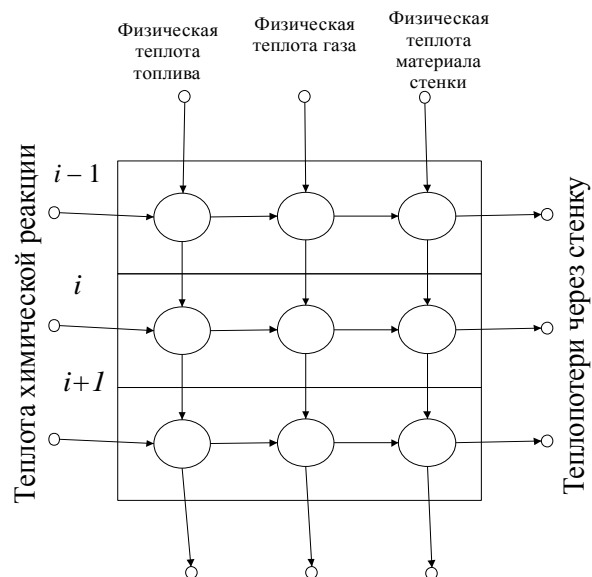


Рис. 2. Граф тепловых потоков в реакционной зоне газогенератора

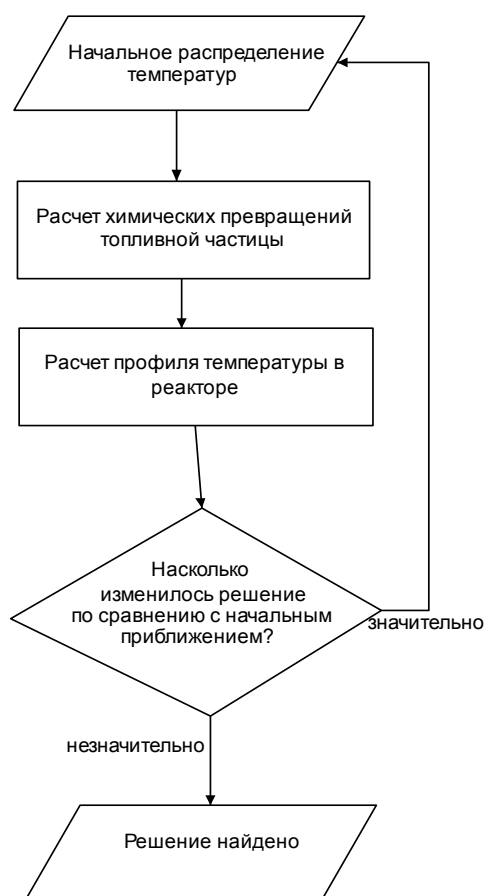


Рис. 3. Алгоритм расчета поточного газогенератора

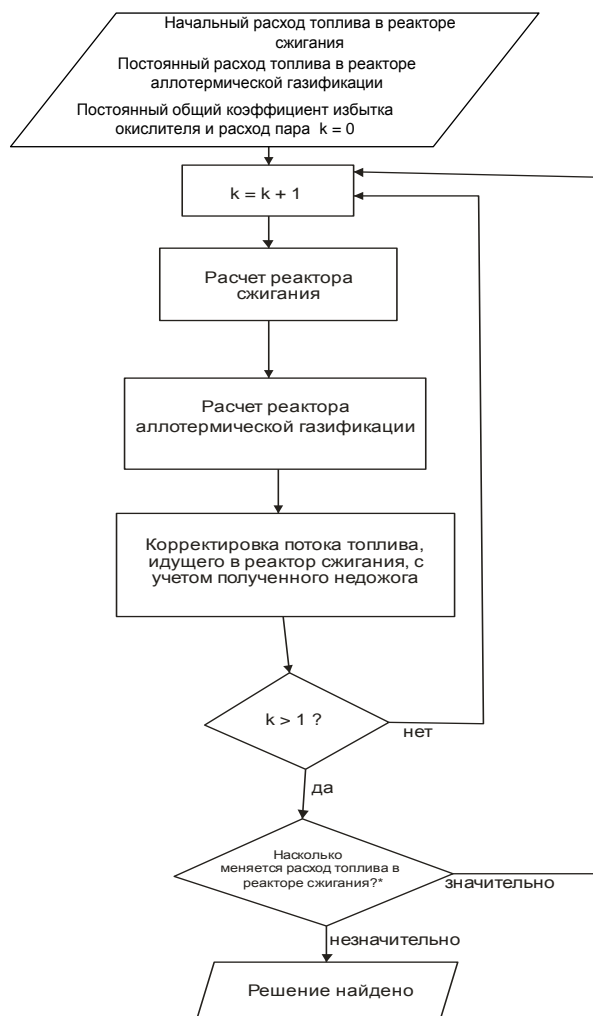


Рис. 4. Общая схема алгоритма для расчета двухступенчатого реактора

Таким образом, предложенная здесь вычислительная схема отличается от предложенных ранее применением термодинамической модели конечного равновесия для расчета состава газовой фазы и применением схемы с расщеплением для расчета реактора в целом.

Расчет согласованной работы двух реакционных зон реактора проводится следующим образом. В основе алгоритма лежит многократное обращение к численной модели превращения частицы топлива в переменном тепловом поле. Эта модель позволяет рассчитать процессы в реакторах сжигания и аллотермической газификации по отдельности. Сначала рассчитывается реактор сжигания, затем полученный на выходе поток газа направляется в реактор аллотермической газификации.

Недогоревший после второй стадии твердый остаток отправляется на первую стадию и дожигается вместе с топливом, поданным на первую стадию. Таким образом, расчет газогенератора происходит итерационно, пока потоки между реакторами не становятся стационарными. Общая схема расче-

та представлена на рис. 4, из которого видно, что для суждения о стационарности процесса требуется как минимум две итерации расчета обоих реакторов. Алгоритм завершает работу, если на двух последовательных итерациях расход топлива в первом реакторе меняется менее чем на 5 %. Как показывают расчеты, достаточно 3-5 итераций для получения стационарного решения. Подобный алгоритм использовался в [17] для расчета ступенчатой схемы процесса газификации твердых топлив в плотном слое.

2. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ ДЛЯ МОДЕЛИ И ЕЕ ОБЩАЯ СТРУКТУРА

Для расчетов был взят уголь марки АКД. Технические характеристики этого угля приведены в табл. 1. Расчеты проводились при значениях констант скорости гетерогенных реакций, приведенных в табл. 2.

Таблица 1

Характеристики угля АКД

Характеристика угля и ее размерность	Значение
Влажность на рабочую массу, %	7.9
Зольность на сухую массу, %	14.95
Выход летучих на сухую беззольную массу, %	30.1
Состав ОМУ на сухую беззольную массу, %	
С	86.0
Н	4.6
О	6.7
N	2.0
S	0.7
Средний размер частиц, мм	0.1
Высшая теплота сгорания, МДж/кг (по Менделееву)	22.53

Таблица 2

Кинетические константы гетерогенных реакций

Реакция	Кинетические параметры	
	Предэкспонент	Энергия активации, кДж/моль
Пиролиз	$3.38 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$	113.3
Реакция с O_2	$2 \cdot 10^5 \text{ м/с}$	177.3
Реакция с CO_2	10^{10} м/с	265.8
Реакций с H_2O	$7.2 \cdot 10^4 \text{ м/с}$	180

3. ВЕРИФИКАЦИЯ МОДЕЛИ

Для верификации модели были использованы экспериментальные данные, полученные японскими исследователями на полупромышленной установке (производительность по углю 2 т/ч). Конструктивные и расходные параметры были приняты по приведенным в работе [8] данным. Рабочее давле-

ние в реакторе составляет 20 атм, длина реактора около 6 м. Был выбран первый из описанных в статье режимов (все режимы, однако, были довольно близки, и различия между ними скорее обусловлены стехиометрическими факторами: расчет показывает, что химические превращения происходят в реакторе довольно быстро). Сравнение температурных профилей приведено на рис. 5. Видно удовлетворительное совпадение измеренных и рассчитанных температурных профилей. Состав газа (см. табл. 3) также достаточно хорошо воспроизводится моделью. Это связано, как уже указывалось, с достаточно быстрым протеканием химических реакций и близостью расчетного и экспериментального режимов к равновесию. Имеются, однако, существенные отличия в величине твердого остатка, рециркулирующего в схеме. Для решения этого вопроса необходимы детальные технические данные (в первую очередь по материальному балансу установки). Такие данные, к сожалению, на настоящий момент недоступны.

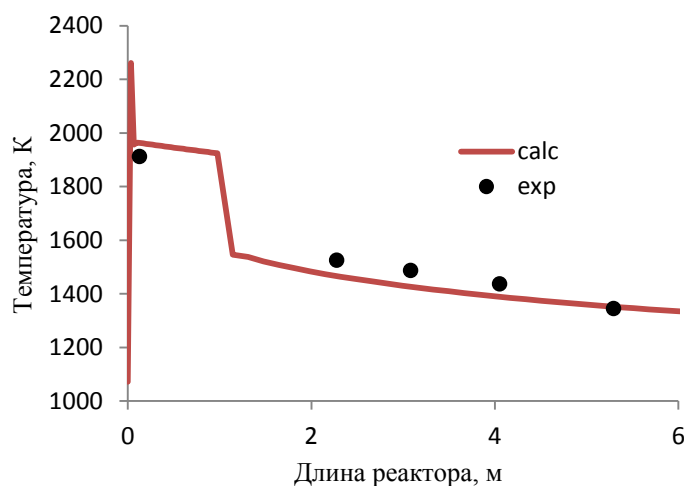


Рис. 5. Профиль температуры газа в реакторе (сплошная линия – расчет, точки – эксперимент [8])

Таблица 3

Сравнение состава генераторного газа из эксперимента и из расчета

Содержание компонентов, % об.	Эксперимент [8]	Расчет
H ₂	7.3	7.4
CO	20.2	20.7
CO ₂	6.3	4.2
H ₂ O	2	6.2

4. ВЛИЯНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРОЦЕССА

С помощью построенной модели были проведены расчеты для исследования влияния управляющих параметров на эффективность процесса газификации. Для расчетов были выбраны режимы, признанные оптимальными в результате термодинамического анализа процесса газификации (в постановке

конечного равновесия). Это серия режимов с небогащенным дутьем при двух распределениях топлива по ступеням газификации (20...80 % и 80...20 %) и с содержанием пара в дутье 0...0.8 моль/моль (ОМУ). Критерием эффективности процесса газификации является его химический КПД – отношение теплоты сгорания горючих газов к теплоте сгорания топлива, из которых они получены.

При заданном расходе пара варьировали коэффициент избытка окислителя (воздуха). Как известно, зависимость химического КПД от коэффициента избытка окислителя при прочих равных условиях носит экстремальный характер: существует оптимальный избыток окислителя, при котором наблюдается полное срабатывание органической массы топлива [18]. При более низких значениях избытка окислителя химический КПД падает из-за образования недожога, при более высоких – из-за сгорания горючих газов. В вариантных расчетах оптимальное значение коэффициента избытка окислителя было найдено с точностью до третьего знака. Для расчетов использовался специальный программный модуль на основе комплекса для расчета химических равновесий Theodore [19]. В результате для каждого режима определено оптимальное значение коэффициента избытка окислителя для условий конечного термодинамического равновесия. Результаты расчетов представлены в табл. 4. Эти значения служат для сравнения с результатами моделирования с учетом диффузионно-кинетических ограничений на достижение конечного равновесия.

Таблица 4

Оптимальные значения коэффициента избытка окислителя для условий термодинамического равновесия

Удельный расход пара	Оптимальный коэффициент избытка окислителя	Химический КПД, %
0	0.382	79.3
0.2	0.342	82.4
0.4	0.316	85.3
0.5	0.304	85.6
0.6	0.291	85.8
0.7	0.278	86
0.8	0.264	84.3

Результаты расчетов показывают, что при небольших добавках пара в дутье решение, полученное с помощью разработанной модели, почти совпадает с решением, полученным с помощью модели конечного равновесия. Однако при добавках пара выше 0.4...0.6 моль/моль углерода топлива становятся значимыми макрокинетические ограничения: разбавление горячего воздуха и эндотермические реакции снижают температуру в реакторе, что приводит к снижению степени конверсии топлива и, как следствие, к общему снижению эффективности работы газогенератора (рис. 6).

Из последнего рисунка видно, что при низком расходе топлива на первую ступень и высоком расходе пара температура газа после первой ступени становится недостаточной для интенсивного протекания аллотермических процессов конверсии топлива, идущих во второй ступени реактора. Химический КПД процесса при этом также падает. При большой доле топлива, поступающего на

первую ступень, процесс становится менее чувствительным к добавкам пара. Однако при этом может возрасти выходная температура газа, что нежелательно. Для оптимизационных исследований в данном случае необходим комплексный критерий, который учтет влияние химической и физической (тепловой) энергии генераторного газа на эффективность работы газогенераторных установок. При этом приходится, однако, рассматривать технологические узлы охлаждения и очистки газа, поэтому задача несколько усложняется.

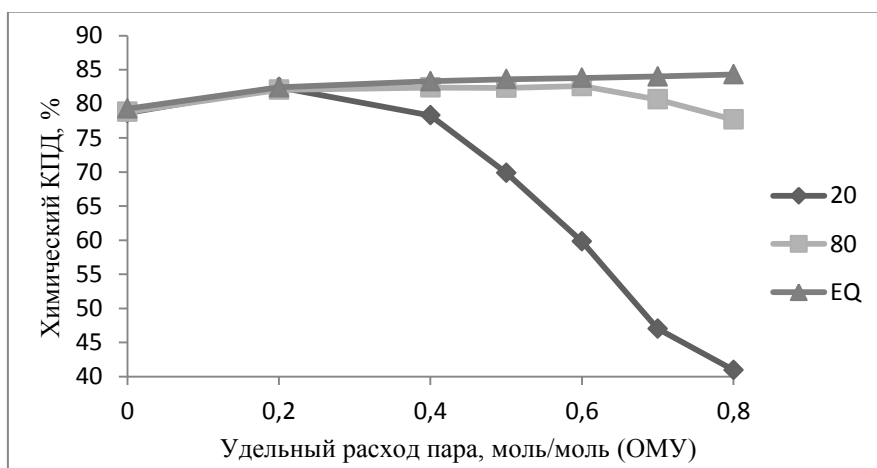


Рис. 6. Зависимость химического КПД от содержания пара в дутье при разной доле топлива, идущего на первую ступень (20 и 80 %), и для равновесного случая (EQ)

Таким образом, при управлении процессом ступенчатой газификации и оценке конструктивных параметров реактора значительную роль будут играть такие параметры режимов, как доля пара в дутье и распределение топлива между ступенями реактора. Дополнительные расчеты позволят выявить и другие особенности процесса, такие как влияние сорта угля, его зольности и влажности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе развита модель физико-химических процессов, протекающих в реакционной зоне ступенчатого поточного газогенератора. В модели учтены основные факторы, влияющие на скорости процессов переноса и гетерогенных химических реакций. Скорость процессов конверсии угольных частиц задается на основании диффузионно-кинетической теории горения и газификации углерода, состав газа считается равновесным.

Проведена верификация модели с использованием литературных данных. Показано согласие результатов моделирования с известными экспериментами. Это обусловлено в том числе близостью условий в опыте и расчете к конечному термодинамическому равновесию.

Проведен анализ причин, которые могут вызывать снижение эффективности процесса. Критерием эффективности является в данном случае химический КПД. Расчеты показывают, что при малой доле топлива, идущего на первую ступень реактора (20 %), и высокой доле пара в дутье эффективность процесса падает существенно ниже термодинамических оценок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Газогенераторные технологии в энергетике / под ред. А.Ф. Рыжкова. – Екатеринбург: Сократ, 2010. – 610 с.
2. Теплосиловые системы. Оптимизационные исследования / А.М. Клер, Н.П. Деканова, Э.А. Тюрина, З.Р. Корнеева, А.Ю. Маринченко. – Новосибирск: Наука, 2005. – 235 с.
3. Накоряков В.Е., Ноздренко Г.В., Кузьмин А.Г. Исследования угольных ПГУ ТЭЦ с комбинированным производством электро-, теплоэнергии, синтез-газа и водорода // Теплофизика и аэромеханика. – 2009. – Т. 16, № 4. – С. 545–551.
4. Guiffrida A., Romano M.C., Lozza G. Thermodynamic analysis of air-blown gasification for IGCC applications // Applied Energy. – 2011. – Vol. 88, iss. 11. – P. 3949–3958. – doi: 10.1016/j.apenergy.2011.04.009.
5. Development of coal gasification system for producing chemical synthesis source gas / T. Hashimoto, K. Sakamoto, K. Ota, T. Iwahashi, Y. Kitagawa, K. Yokohama // Mitsubishi Heavy Industries Technical Review. – 2010. – Vol. 47, N 4. – P. 27–32.
6. Hanjalic K., Sijeric K. Application of computer simulation in a design study of a new concept of pulverized coal gasification. Pt. 1. Rationale of the concept and model of hydrodynamics and heat transfer in the reactor // Combustion Science and Technology. – 1994. – Vol. 97, iss. 4–6. – P. 331–350. – doi: 10.1080/00102209408935384.
7. Sijeric M., Hanjalic K. Application of computer simulation in a design study of a new concept of pulverized coal gasification. Pt. 2. Model of coal reactions and discussion of results // Combustion Science and Technology. – 1994. – Vol. 97, iss. 4–6. – P. 351–375. – doi: 10.1080/00102209408935385.
8. Watanabe H., Otake M. Numerical simulation of coal gasification in entrained flow coal gasifier // Fuel. – 2006. – Vol. 85, iss. 12–13. – P. 1935–1943. – doi: 10.1016/j.fuel.2006.02.002.
9. Modeling and simulation of coal gasification on an entrained flow coal gasifier with a recycled CO₂ injection / H. Watanabe, K. Tanno, H. Umetsu, S. Umemoto // Fuel. – 2015. – Vol. 142. – P. 250–259. – doi: 10.1016/j.fuel.2014.11.012.
10. Monaghan R.F.D., Ghoniem A.F. A dynamic reduced order model for simulating entrained flow gasifiers. Pt. 2: Model validation and sensitivity analysis // Fuel. – 2012. – Vol. 94. – P. 280–297. – doi: 10.1016/j.fuel.2011.08.046.
11. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – М.: Наука, 1987. – 502 с.
12. Донской И.Г., Шаманский В.А. Применение моделей последовательных равновесных состояний для описания газификации твердых топлив: доклад № 8-2-08 // Всероссийская конференция XXXI «Сибирский теплофизический семинар», посвященный 100-летию со дня рождения академика С.С. Кутателадзе, 17–19 ноября 2014, Новосибирск, Россия: доклады. – Новосибирск: ИТ СО РАН, 2014. – С. 196–199.
13. Ковенский В.И. Об одном методе расчета слоевого горения коксового остатка твердого топлива // Теоретические основы химической технологии. – 2012. – Т. 46, № 2. – С. 216–228.
14. Расчет режимов слоевой газификации угля с помощью термодинамической модели с макрокинетическими ограничениями / И.Г. Донской, А.В. Кейко, А.Н. Козлов, Д.А. Свищев, В.А. Шаманский // Теплоэнергетика. – 2013. – № 12. – С. 56–61.
15. Махвиладзе Г.М., Мелихов В.И. Численный метод исследования процессов медленно-го горения газов // Математическое моделирование. – 1989. – Т. 1, № 6. – С. 146–157.
16. Снытников В.Н., Юрченко Е.М. Схема расщепления для задач фильтрации газа с химическими реакциями // Вычислительные технологии. – 2001. – Т. 6, № 5. – С. 95–105.
17. Донской И.Г. Математическое моделирование ступенчатой газификации угля в плотном слое // Горение и плазмохимия. – 2013. – Т. 12, № 4. – С. 376–382.
18. Prins M.J., Ptasiński K.J., Janssen F.J.J.G. Thermodynamics of gas-char reactions: first and second law analysis // Chemical Engineering Science. – 2003. – Vol. 58, iss. 3–6. – P. 1003–1011. – doi: 10.1016/S0009-2509(02)00641-3.
19. Технология термодинамического моделирования. Редукция моделей движения к моделям покоя / Б.М. Каганович, А.В. Кейко, В.А. Шаманский, И.А. Ширкалин, М.С. Зароднюк. – Новосибирск: Наука, 2010. – 236 с.

Донской Игорь Геннадьевич, кандидат технических наук, научный сотрудник лаборатории термодинамики ИСЭМ СО РАН. Основное направление исследований – математическое моделирование процессов термохимической конверсии твердых топлив. Имеет 11 публикаций, в том числе одну монографию. E-mail: donskoy.chem@mail.ru

Свищев Денис Алексеевич, ведущий инженер лаборатории термодинамики ИСЭМ СО РАН. Основное направление исследований – теоретические и экспериментальные основы повышения эффективности процессов газификации твердых топлив. Имеет 13 публикаций, в том числе одну монографию. E-mail: woodgas@ya.ru

Шаманский Виталий Алексеевич, кандидат химических наук, заведующий лабораторией термодинамики ИСЭМ СО РАН. Основное направление исследований – математическое моделирование сложных химических систем. Имеет 14 публикаций, в том числе 2 монографии. E-mail: vita@isem.sei.irk.ru

Козлов Александр Николаевич, младший научный сотрудник лаборатории термодинамики ИСЭМ СО РАН. Основное направление исследований – термический анализ процессов термохимической конверсии топлив. Имеет 13 публикаций, в том числе одну монографию. E-mail: kozlov@isem.sei.irk.ru

Mathematical modelling of the staged pulverized coal gasification process*

I.G. DONSKOY¹, D.A. SVISHCHEV², V.A. SHAMANSKY³, A.N. KOZLOV⁴

¹ Melentiev Energy Systems Institute of the Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, 130 Lermontov St., Irkutsk, 664033, Russian Federation, PhD (Eng.) research fellow. E-mail: donskoy.chem@mail.ru

² Melentiev Energy Systems Institute of the Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, 130 Lermontov St., Irkutsk, 664033, Russian Federation, chief engineer. E-mail: woodgas@ya.ru

³ Melentiev Energy Systems Institute of the Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, 130 Lermontov St., Irkutsk, 664033, Russian Federation, PhD (Chem.), laboratory head. E-mail: vita@isem.sei.irk.ru

⁴ Melentiev Energy Systems Institute of the Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, 130 Lermontov St., Irkutsk, 664033, Russian Federation, junior research fellow. E-mail: kozlov@isem.sei.irk.ru

The design of modern internal coal gasification combined-cycle power plants requires instruments to calculate fuel conversion process parameters. For instance, gasification-produced gas composition and its output temperature are needed to choose optimum power plant parameters. To this end one must have a relevant mathematical model in which physicochemical features of the process are taken into account. The paper considers a mathematical model of the pulverized coal entrained-flow gasification process. It is similar to the process proposed by the Mitsubishi Heavy Industries (MHI) including two fuel conversion stages. A fuel and an oxidizer (air) are fed to the first stage in the proportion that is sufficient to provide full combustion. A fuel and hot gases (combustion products) are fed to the second stage from the first stage. The staged process makes it possible to decrease an output product gas temperature. The unburned solid fuel produced at the second stage is recycled to the first stage, which allows using low oxygen content in blowing. The proposed model is one-dimensional and considers unburned coal recirculation and staged fuel feeding. The rate of the heterogeneous chemical reaction is determined by equations of the diffusion-kinetic solid fuel combustion theory and the gas composition at every moment is assumed to be in local equilibrium. Temperature distribution is calculated using a numerical difference scheme with physical processes splitting. A numerical algorithm for solving this problem is proposed. Modelling results are compared with experimental data. Using this model some optimal parameters are calculated based on the thermodynamic equilibrium analysis of the gasification process. Boundaries of thermodynamic estimates of the performance of staged gasifier operating conditions are found.

* Received 20 August 2014.

This work was supported by the Russian Fund for Basic Research (grant No. 14-08-01226A).

Keywords: entrained-flow pulverized coal gasification; staged gasification process; air blown process; mathematical modeling; diffusion kinetics; heat and mass transfer; thermodynamic-kinetic models; cold gas efficiency

DOI: 10.17212/1814-1196-2015-1-231-245

REFERENCES

1. Ryzhkov A.F., ed. *Gazogeneratornye tekhnologii v energetike* [Gasification technologies in energetics]. Ekaterinburg, Sokrat Publ., 2010. 610 p. (In Russian)
2. Kler A.M., Dekanova N.P., Tyurina E.A., Korneeva Z.R., Marinchenko A.Yu. *Teplosilovye sistemy. Optimizatsionnye issledovaniya* [Heat power systems: optimization study]. Novosibirsk, Nauka Publ., 2005. 235 p. (In Russian)
3. Nakoryakov V.E., Nozdrenko G.V., Kuz'min A.G. Issledovaniya ugol'nykh PGU TETs s kombinirovannym proizvodstvom elektro-, teploenergii, sintez-gaza i vodoroda [Investigation of coal fired combined-cycle cogeneration plants for power, heat, syngas and hydrogen]. *Teplofizika i aeromekhanika – Thermophysics and Aeromechanics*, 2009, vol. 16, no. 4, pp. 545–551.
4. Guiffrida A., Romano M.C., Lozza G. Thermodynamic analysis of air-blown gasification for IGCC applications. *Applied Energy*, 2011, vol. 88, iss. 11, pp. 3949–3958. doi: 10.1016/j.apenergy.2011.04.009
5. Hashimoto T., Sakamoto K., Ota K., Iwahashi T., Kitagawa Y., Yokohama K. Development of coal gasification system for producing chemical synthesis source gas. *Mitsubishi Heavy Industries Technical Review*, 2010, vol. 47, no. 4, pp. 27–32.
6. Hanjalic K., Sijeric K. Application of computer simulation in a design study of a new concept of pulverized coal gasification. Pt. 1. Rationale of the concept and model of hydrodynamics and heat transfer in the reactor. *Combustion Science and Technology*, 1994, vol. 97, iss. 4–6, pp. 331–350. doi: 10.1080/00102209408935384
7. Sijeric M., Hanjalic K. Application of computer simulation in a design study of a new concept of pulverized coal gasification. Pt. 2. Model of coal reactions and discussion of results. *Combustion Science and Technology*, 1994, vol. 97, iss. 4–6, pp. 351–375. doi: 10.1080/00102209408935385
8. Watanabe H., Otaka M. Numerical simulation of coal gasification in entrained flow coal gasifier. *Fuel*, 2006, vol. 85, iss. 12–13, pp. 1935–1943. doi: 10.1016/j.fuel.2006.02.002
9. Watanabe H., Tanno K., Umetsu H., Umemoto S. Modeling and simulation of coal gasification on an entrained flow coal gasifier with a recycled CO₂ injection. *Fuel*, 2015, vol. 142, pp. 250–259. doi: 10.1016/j.fuel.2014.11.012
10. Monaghan R.F.D., Ghoniem A.F. A dynamic reduced order model for simulating entrained flow gasifiers. Pt. 2. Model validation and sensitivity analysis. *Fuel*, 2012, vol. 94, pp. 280–297. doi: 10.1016/j.fuel.2011.08.046
11. Frank-Kamenetskii D.A. *Diffuziya i teploperedacha v khimicheskoi kinetike* [Diffusion and heat transfer in chemical kinetics]. Moscow, Nauka Publ., 1987. 502 p. (In Russian)
12. Donskoi I.G., Shamanskii V.A. [Application of sequential equilibria models in solid fuel gasification description: report № 8-2-08]. *Trudy Vserossiiskoi konferentsii XXXI «Sibirskii teplofizicheskii seminar», posvyashchennoi 100-letiyu so dnya rozhdeniya akademika S.S. Kutateladze, 17–19 noyabrya 2014, Novosibirsk, Rossiya* [Proceedings of the All-Russian Conference XXXI "Siberian seminar on thermophysics", dedicated to the 100th anniversary of academician S.S. Kutateladze], Novosibirsk, Russia, IT SB RAS Publ., November 17–19, 2014, pp. 196–199. (In Russian)
13. Kovenskii V.I. Ob odnom metode rascheta sloevogo goreniya koksovogo ostatka tverdogo topliva [Method of calculating the bed combustion of a solid fuel coke residue]. *Teoreticheskie osnovy khimicheskoi tekhnologii – Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2012, vol. 46, no. 2, pp. 180–192.
14. Donskoi I.G., Keiko A.V., Kozlov A.N., Svishchev D.A., Shamanskii V.A. Raschet rezhimov slovoi gazifikatsii uglya s pomoshch'yu termodinamicheskoi modeli s makrokineticheskimi ogranicheniyami [Calculation of the fixed bed coal gasification regimes by the use of thermodynamic model with macrokinetic constraints]. *Teploenergetika – Thermal Engineering*, 2013, vol. 60, iss. 12,

pp. 904–909. doi: 10.1134/S0040601513120069. Translated from *Teploenergetika*, 2013, no. 12, pp. 56–61.

15. Makhviladze G.M., Melikhov V.I. Chislennyi metod issledovaniya protsessov medlennogo goreniya gazov [A numerical method for the investigation of slow gas combustion]. *Matematicheskie modelirovanie – Mathematical modelling*, 1989, vol. 1, no. 6, pp. 146–157. (In Russian)

16. Snytnikov V.N., Yurchenko E.M. Skhema rasshchepleniya dlya zadach fil'tratsii gaza s khimicheskimi reaktsiyami [Splitting scheme for the problems of gas filtration with chemical reactions]. *Vychislitel'nye tekhnologii – Computational technologies*, 2001, vol. 6, no. 5, pp. 95–105. (In Russian)

17. Donskoi I.G. Matematicheskoe modelirovanie stupenchatoi gazifikatsii uglya v plotnom sloe [Mathematical modeling of the fixed bed staged coal gasification]. *Gorenie i plazmokhimiya – Combustion and Plasmochemistry*, 2013, vol. 12, no. 4, pp. 376–382. (In Russian)

18. Prins M.J., Ptasinski K.J., Janssen F.J.J.G. Thermodynamics of gas-char reactions: first and second law analysis. *Chemical Engineering Science*, 2003, vol. 58, iss. 3–6, pp. 1003–1011. doi: 10.1016/S0009-2509(02)00641-3

19. Kaganovich B.M., Keiko A.V., Shamanskii V.A., Shirkalin I.A., Zarodnyuk M.S. *Tekhnologiya termodinamicheskogo modelirovaniya. Reduktsiya modelei dvizheniya k modelyam pokoya* [Thermodynamic model engineering. Motion models reduction to rest models]. Novosibirsk, Nauka Publ., 2010. 236 p. (In Russian)