

## Визначення параметрів процесу газифікації вуглецевмісних матеріалів у барабані-охолоджувачі обертової печі

А. Я. Карвацький, Т. В. Лазарєв, С. В. Лелека, І. О. Мікульонок,  
О. І. Іваненко

*Проведено оцінку доцільності застосування діючого обладнання барабана-охолоджувача обертової печі для термооброблення вуглецевмісного наповнювача для одержання синтез-газу з використанням відходів виробництва у вигляді пилової фракції термообробленого нафтового коксу або антрациту. Сформульовано математичну модель процесу газифікації частинок вуглецю в континуально-дискретній постановці, що включає тринадцять глобальних реакцій, з яких чотири – гетерогенні і дев'ять – гомогенні. Розроблено числову модель газифікації пилової фракції вуглецевмісного наповнювача в барабані-охолоджувачі обертової печі у вісесиметричному формулюванні. Досліджено збіжність числового розв'язку задачі газифікації за кроком сітки. Встановлено, що розрахункова сітка, яка включає 73620 комірок і 75202 вузлів, призводить до похибки визначення основних параметрів моделі не більше 1–2 %. Виконано верифікацію розробленої числової моделі. Встановлено, що різниця між молярними частками CO і H<sub>2</sub>, значення яких одержано за різних програмних продуктів (Fluent, CEA NASA), перебуває в межах (2,8...5,8) %. З використанням розробленої числової моделі процесу газифікації вуглецевмісного наповнювача в барабані-охолоджувачі обертової печі визначено кількісний склад горючих компонентів синтетичного газу за різних вихідних параметрів. Встановлено, що за умови співвідношення O<sub>2</sub>/C=(42,7...51,6) % прогнозований кількісний склад горючих газів синтез-газу в молярних частках складає: CO=(32,8...36,9) %, H<sub>2</sub>=(17,1...18,4) % і CH<sub>4</sub>=(0,03...0,16) %. Показано можливість застосування програми CEA NASA, призначену для оперативних розрахунків рівноважної хімії, для інженерних розрахунків матеріального складу синтез-газу промислового пічного обладнання.*

*Ключові слова: обертова піч, барабан-охолоджувач, вуглецевмісний матеріал, термооброблення, газифікація, синтез-газ, числове моделювання.*

### 1. Вступ

Значна вартість природного газу, а також необхідність дотримання жорстких вимог екологічної безпеки промислових підприємств, спричиняють перехід енергетики та інших галузей промисловості на збільшення використання твердого палива з попередньою його газифікацією. Відомо, що газифікація – це процес, що відбувається за використання теплоти та водяної пари для перетворення вуглецевмісних матеріалів на синтез-газ. До складу останнього входять такі горючі гази як монооксид вуглецю, водень і метан.

Це у свою чергу зумовило появу великої кількості розробок реакторного обладнання для газифікації та досліджень процесів газифікації твердого палива і біомаси, зокрема, числовими методами обчислювальної гідродинаміки [1–13]. В зазначених працях не розглядається питання використання діючого промислового пічного обладнання для процесів газифікації твердого палива. Таким чином, питання застосування синтетичного газу, отриманого в результаті газифікації вуглецевмісних матеріалів, у різних галузях промисловості з використанням наявного обладнання є актуальним завданням та потребує ретельного обґрунтування.

## 2. Аналіз літературних даних і постановка проблеми

Під час дослідження процесів газифікації важливою проблемою є хімічна кінетика та механізми, що відповідають за процеси горіння й можуть включати велику кількість компонентів реакцій та елементарних реакцій [14]. Для вирішення зазначеної проблеми хімічної кінетики використовуються два основних підходи. Перший з яких базується на детальних багатоступневих хімічних реакціях [15, 16], а другий – на використанні спрощених глобальних реакцій зі значно меншою кількістю як компонентів, так і реакцій.

Основними недоліками першого підходу є потреба у значних обчислювальних ресурсах та обмеженість застосування для розвинених турбулентних режимів. Зазначений підхід застосовується лише для ламінарного або надзвукowego режимів горіння, тобто за умов відносно повільної хімії й малої взаємодії кінетики з турбулентними потоками.

Головним недоліком другого підходу можуть бути некоректні результати числового моделювання за умови більш ніж двоступінчастих реакцій та використанні комбінованої моделі кінцевої швидкості/вихрової дисипації [14].

Вдалим прикладом зменшення кількості реакцій може бути стаття [17], в якій наведено скорочений глобальний механізм спалювання синтез-газу, що складається з двох етапів замість двадцяти багатоступінчастих хімічних реакцій.

У статтях [1–13] використовується підхід з обмеженою кількістю реакцій і передусім разом з комбінованою моделлю кінцевої швидкості/вихрової дисипації.

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 і псевдотвердої фаз використовується CFD підхід. При цьому для твердої фази на підставі кінетичної теорії гранульної течії записуються додаткові рівняння.

Майже у всіх зазначених працях турбулентні режими газифікації описуються осередненими за Reynolds і Favre рівняннями Нав'є-Стокса (Reynolds averaged Navier-Stokes equations (RANS) з використанням стандартної або realizable  $k$ - $\epsilon$  моделей).

У працях [1–6] для визначення основних параметрів процесу газифікації твердого горючого матеріалу використовується DPM або Euler-Lagrange формулювання, у той час як статтях [7, 9–13] побудовані на Euler-Granular Multiphase або Euler-Euler формулюваннях, а в праці [8] використано обидві моделі.

Числові дослідження у статтях [3–5, 7–10, 12, 14, 17] виконано з використанням програмних продуктів ANSYS Fluent, CFX [18].

Euler-Granular Multiphase формулювання передбачає розв'язання нестационарної задачі з кроком інтегрування за часом малого масштабу і відповідно потребує значних часових ресурсів. Використання DPM моделі дає змогу отримати розв'язок задачі у стаціонарному наближенні за відносно малу кількість ітерацій [18].

Проте застосування DPM формулювання накладає жорсткі обмеження в частині об'ємної частки твердої фази, яка не повинна перевищувати 10 % від об'єму газової фази [18]. При цьому для забезпечення стабільності розв'язку задачі відношення масової витрати твердих частинок до маси газу має бути  $\leq 1$  [3]. У разі використання Euler-Granular Multiphase формулювання задачі вказані обмеження відсутні [18].

У праці [1] з використанням DPM моделі та вісесиметричної постановки задачі проведено числове дослідження газифікатора із захопленим потоком вугільної суспензії. Модель газифікації вугілля базується на чотирьох гетерогенних та п'яти гомогенних реакціях. Досліджено вплив співвідношення  $O_2$ /вугілля на розподіл швидкості, температури та концентрації компонентів. Результати числового аналізу задовільно узгоджуються з експериментальними даними.

Стаття [2] також присвячена числовому дослідженню газифікатора з типом подачі вугільної суспензії захопленим потоком з використанням Euler-Lagrange моделі. Комплексна числова модель для імітації процесу газифікації вугілля побудована на підставі розділення складного процесу на декілька спрощених етапів. До них відносяться випаровування суспензії, devolatilization вугілля та двофазні реакції в поєднанні з турбулентним потоком і двофазною теплопередачею. Модель базується на семи реакціях, з яких чотири є гетерогенними, а решта – гомогенними. Результати моделювання зіставлено з експериментальними даними у вигляді відношення  $O_2$ /вугілля. Встановлено, що розрахункова конверсія вуглецю узгоджується з виміряними значеннями. Показано, що в разі збільшення відношення  $O_2$ /вугілля якість синтез-газу погіршується, що пояснюється втратою теплоти через газогенератор та невизначеністю кінетики гетерогенних реакцій.

Гідродинамічну числову модель двоступінчастого газо-газового газифікатора з вугільною суспензією, який продувається киснем та розрахований для застосування на сучасних електростанціях, наведено у статті [3]. Для моделювання потоку вугільної суспензії використовується DPM модель, за допомогою якої відстежуються конкретні фізичні процеси, що відбуваються з частинками вугілля: виділення вологи та випаровування, видалення летких речовин, окиснення та газифікація. Показано, що розроблена числова модель газифікації прогнозує склад синтез-газу близький до значень, отриманих за моделлю реактора

з обмеженою рівновагою. Встановлено, що конверсія частинок вугілля складає 100 % і 86 % для першої і другої стадій, відповідно.

Модель газифікації вугілля, запропонованої у праці [4], включає моделі піролізу, газифікації вугілля та реакції в газовій фазі з використанням Euler-Lagrange формулювання. Числове моделювання з використанням моделі газифікації вугілля проведено на газифікаторі вугілля із захопленим потоком дослідницького масштабу. Досліджено вплив співвідношення повітря/вугілля на характеристики газифікації, такі як ефективність конверсії вуглецю за прохід, кількість напівкоксу, теплотворна здатність газоподібного продукту та ефективність холодного газу. Зіставлення розрахункових та експериментальних даних показує, що більшість характеристик продуктивності газифікації точно ідентифікуються за допомогою числового моделювання.

У статті [5] представлено комплексну числову 3D модель двоступінчастого газифікатора для моделювання газифікації потоку вугільної суспензії. Для врахування турбулентності потоків у газифікаторі використовується realizable  $k$ - $\epsilon$  модель. Для врахування турбулентного впливу на газозазні реакції в газифікаторі застосовується метод передбачуваної функції щільності ймовірності (probability density function (PDF)). Рух частинок вугільної суспензії описується в системі відліку Lagrange з врахуванням таких процесів як випаровування води, видалення летких та чотирьох гетерогенних реакцій частинок вугілля. Для об'єднання взаємодії газової фази з твердими частинками використовується метод «джерело частинок у розрахунковій комірці». Розрахунки процесу газифікації за підвищеного тиску 4,2 МПа показали узгодженість з експериментальними даними. Встановлено, що за підвищення концентрації вугільної суспензії зростає конверсія вугілля. У результаті підвищення температури концентрація CO стрімко зростає, а концентрація  $H_2$  дещо знижується.

Тривимірний модель гідродинаміки системи газифікації біомаси з подвійним псевдозрідженим шаром з використанням Euler-Lagrange формулювання наведена у праці [6]. Для моделювання течій газ-тверді частинки в газифікаторі з подвійним псевдозрідженим шаром використовувався метод MP-PIC (multiphase particle-in-cell), що є аналогом DPM. Метою цієї роботи був пошук ефективних способів покращення циркуляції твердих речовин у газифікаторі. Перевірка точності розрахунків за розробленою числовою моделлю газифікатора здійснена методом подвійного перерахунку. Числові дослідження за атмосферного тиску проведено з метою визначення впливу конструктивно-технологічних параметрів газифікатора на швидкість циркуляції твердих частинок залежно від їхніх розмірів, а також витрати водяної пари й повітря.

Стаття [7] присвячена моделюванню процесів газифікації вугілля в газифікаторі з циркулюючим псевдозрідженим шаром з використанням Euler-Euler формулювання. Для моделювання турбулентних режимів течії газової фази застосовується стандартна  $k$ - $\epsilon$  модель, а моделювання твердої фази базується на кінетичній теорії гранульованого потоку. Модель з глобальними хімічними реакціями включала одинадцять реакцій поверхневого та об'ємного типів. Для вибору раціональної кінетичної швидкості реакцій аналіз чутливості було виконано на реакції газифікації напівкоксу. Досліджено вплив робочої температури

ри, співвідношення пара/вугілля та повітря/вугілля на склад синтетичного газу на виході з газифікатора. Показано, що отримані залежності цих параметрів узгоджуються з літературними даними, що підтверджує застосовність Euler-Granular Multiphase формулювання для моделювання процесів газифікації вугілля в газифікаторах з циркулюючим псевдозрідженим шаром.

Праця [8] присвячена детальному дослідженню застосування різних формулювань (підходів) Euler-Euler та Euler-Lagrange для моделювання процесів газифікації. Детальний опис і схему зв'язку потоку газу з твердими частинками та хімічними реакціями двох підходів наведено окремо. Хімічна модель включає тридцять гетерогенних і гомогенних реакцій. Показано, що існуючі в літературі числові моделі здебільшого включають Euler модель з кількома рідинами, модель CFD-DEM (Discrete Element Methods) або MP-PIC (multiphase particle-in-cell). У статті також аналізуються відповідні переваги та обмеження застосування вказаних моделей.

У статті [9] виконано дослідження процесу газифікації в газифікаторі з циркуляційним псевдозрідженим шаром з потужністю камери згоряння 50 кВт. Розроблено 3D модель спалювання вугілля в атмосфері повітря на базі Euler-Euler формулювання. Кінетична модель включає п'ятнадцять глобальних гетеро- та гомогенних хімічних реакцій. Порівняння результатів числового аналізу з експериментом показало задовільний збіг даних.

Стаття [10] присвячена 3D моделюванню повного циклу газифікатора з циркулюючим псевдозрідженим шаром на основі Euler-Granular Multiphase формулювання. Кінетична модель включає шістнадцять глобальних гетеро- та гомогенних хімічних реакцій. Верифікація числової моделі проведена за експериментальними даними, взятими з інших літературних джерел. Показано, що синтез-газ від газифікатора з циркулюючим псевдозрідженим шаром містить більше CO і  $H_2$ , ніж синтез-газ від газифікатора з барботажем псевдозрідженим шаром.

У праці [11] показано, що 2D моделювання не може повністю замінити 3D моделювання і може тільки використовуватись для якісних досліджень. У цій статті розглядається новий псевдодвовимірний підхід до моделювання з перевагами двовимірних декартових і вісесиметричних припущень. Моделювання потоку газ-тверда речовина в бульбашковому псевдозрідженому шарі проведено на базі Euler-Euler формулювання з використанням вільно відкритого програмного забезпечення MFIX [19]. Порівняння результатів псевдодвовимірного моделювання і 2D аналізу з експериментальними даними показало переваги першого підходу.

У статті [12] показано, що інтегрований комбінований цикл газифікації із захопленим потоком вуглецю є життєздатною технологією управління парниковими газами при використанні вугілля для виробництва електроенергії або отримання водню. Описано пілотне обладнання для газифікації вугілля під тиском, а також можливість моделювання на основі Euler-Euler формулювання з метою вдосконалення комерційної технології газифікації вугілля. Модель хімічних реакцій включає сім гетерогенних і гомогенних реакцій. Також представлено підхід до моделювання газифікації, його сучасні прогностичні показники та

потенційні сфери для подальшого вдосконалення. Результати числового моделювання добре збігаються з даними отриманими за допомогою програми CEA NASA [20], призначеної для розрахунків рівноважної хімії.

Математичну модель фізичних і хімічних процесів, що проходять під час газифікації твердого палива в реакторі з псевдозрідженим шаром на базі Euler-Granular Multiphase формулювання, наведено у праці [13]. Проаналізовано фізичні та хімічні процеси в реакційній зоні газифікатора. Сформульовано основну систему диференціальних рівнянь механіки континууму для багатофазного потоку з урахуванням тепло- і масообміну, турбулентності та хімічних реакцій у ефективному просторі газифікатора. Наведено фізичні рівняння стану середовища та алгебраїчні рівняння для розрахунку коефіцієнта обміну між твердими частинками та потоком газу. Кінетична модель включає десять глобальних гетеро- та гомогенних хімічних реакцій. Визначено кінетичні швидкості хімічних реакцій процесу газифікації.

У проаналізованих працях [1–13] розглядається спеціалізоване обладнання для газифікації твердих вуглецевмісних матеріалів і зовсім не приділяється уваги до модернізації наявного промислового обладнання з метою одержання синтетичного газу. При цьому кінетика хімічних реакцій газифікації, що представлена у цих статтях, значно різниться між собою. Це стосується як порядку хімічних реакцій та енергії активації, так і особливо значень та розмірності передекспоненціальних множників кінетичного рівняння Arrhenius, що робить їх використання вельми проблематичним.

Таким чином, невирішеною частиною розглянутої проблематики є питання доцільності застосування синтетичного газу, отриманого в результаті газифікації вуглецевмісних матеріалів, в умовах діючих виробництв різних галузей промисловості. Аналіз зазначеного питання розглянемо на базі виробництва вуглецевмісного наповнювача електродної промисловості.

Відомо, що для одержання вуглецевмісного наповнювача з нафтового коксу або антрациту з метою виробництва вуглецевої продукції застосовуються обертові печі, для підтримки температурного режиму яких використовується теплота від спалювання природного газу. Технологічний режим термооброблення в цих печах полягає в такому [21]. З холодного торця барабана печі, який має певний нахил до горизонту, подається сирий матеріал. Завдяки нахилу барабана печі та його обертанню матеріал поступово рухається вздовж печі й піддається термообробленню за температури понад 1200–1300 °C за рахунок теплоти від спалювання природного газу, а також легких і частково вуглецевмісного матеріалу. Вивантаження матеріалу здійснюється з гарячого кінця печі, з боку якого по осі печі встановлено пальник природного газу. Димові гази в барабані печі рухаються в напрямку, протилежному руху матеріалу. Після вивантаження термооброблений наповнювач з температурою близько 950 °C потрапляє в обертовий барабан-охолоджувач печі, де він охолоджується й далі надходить до бункера-нагромаджувача.

Для зменшення витрати природного газу в технології виробництва вуглецевмісного наповнювача пропонується застосовувати синтез-газ. Для генерації синтез-газу передбачається використовувати модернізоване діюче обладнання

барабана-охолоджувача печі, пилову фракцію термообробленого матеріалу, що уловлюється циклонами димососа, а також теплоту матеріалу та димових газів.

При цьому модернізація барабана-охолоджувача полягає в організації системи подачі вуглецевої пилової фракції разом з водяною парою та розведеного гарячими димовими газами повітря, що надходить у процес газифікації частинок матеріалу. Крім того, внаслідок обертання матеріалу в барабані-охолоджувачі утворюється дрібна фракція термообробленого матеріалу, яка також бере участь у процесі газифікації.

### **3. Мета і задачі дослідження**

Мета роботи полягає в аналізі доцільності застосування діючого обладнання обертючих печей з термооброблення вуглецевмісних матеріалів для одержання синтез-газу з використанням відходів виробництва у вигляді пилової фракції термообробленого нафтового коксу або антрациту.

Для досягнення мети були поставлені такі завдання:

- сформулювати математичну модель процесу газифікації частинок вуглецевмісного матеріалу в континуально-дискретній постановці з використанням глобальних реакцій зазначеного процесу;
- розробити числову модель процесу газифікації сипкого вуглецевмісного матеріалу в барабані-охолоджувачі обертючої печі у вісесиметричному формулюванні;
- обґрунтувати доцільність процесу газифікації вуглецевмісного наповнювача в барабані-охолоджувачі обертючої печі та виконати верифікацію розробленої числової моделі.

### **4. Математична модель задачі газифікації вуглецевмісного матеріалу**

Математичне формулювання задачі газифікації вуглецевмісного матеріалу на базі DPM для суміші реагуючих газів із врахуванням турбулентного режиму течії, теплового випромінювання та взаємодії з дискретною твердою фазою включає систему рівнянь RANS, яка містить: рівняння збереження маси, збереження кількості руху, переносу компонентів хімічних реакцій, збереження енергії і два рівняння  $k$ - $\epsilon$  моделі турбулентності для турбулентної кінетичної енергії та її дисипації [18]:

$$\left\{ \begin{array}{l}
\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}) = S_{pm}; \\
\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{v}}{\partial t} + (\bar{\rho} \tilde{v} \cdot \nabla) \tilde{v} = -\nabla \bar{p} + \nabla \cdot \bar{\tau}_{eff} + \bar{\rho} g + S_{pv}; \\
\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{Y}_k) = \nabla \cdot \bar{J}_k + \bar{\omega}_k, \quad k = \overline{1, N}; \\
\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{h}) = \bar{\omega}_T + \nabla \cdot \bar{p} + \nabla \cdot \left( \overline{\lambda \nabla T} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla h \right) + \\
+ \overline{\bar{\tau}_{eff} : \nabla v} - \nabla \cdot \left( \overline{\rho \sum_{k=1}^N J_k h_k} \right) + S_{rad} + S_{ph}; \\
\frac{\partial (\bar{\rho} k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + \bar{\tau}_{eff} : \nabla \tilde{v} - \bar{\rho} \varepsilon; \\
\frac{\partial (\bar{\rho} \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \varepsilon) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \\
+ C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} (\bar{\tau}_{eff} : \nabla \tilde{v}) - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k}; \\
\bar{p} = \bar{\rho} \frac{R}{W} \tilde{T},
\end{array} \right. \quad (1)$$

де  $\bar{\phantom{x}}$ ,  $\tilde{\phantom{x}}$  – означає, що величина осереднена за Reynolds і Favre, відповідно;

$\rho$  – густина, кг/м<sup>3</sup>;

$t$  – час, с;

$\nabla$  – оператор Гамільтона, м<sup>-1</sup>;

$\tilde{v}$  – вектор швидкості, м/с;

$\bar{p}$  – тиск, Па;

$\bar{\tau}_{eff} = (\mu + \mu_t) \left[ \nabla \tilde{v} + \tilde{v} \nabla - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{v}) I \right] - \frac{2}{3} \bar{\rho} k I$  – тензор ефективних напружень, Па;

$\mu$  – динамічна в'язкість, Па·с;  $\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$  – турбулентна в'язкість, Па·с;

$k$  – турбулентна кінетична енергія, Дж/кг;

$\varepsilon$  – швидкість дисипації турбулентної кінетичної енергії, Дж/(кг·с);

$I$  – одиничний тензор другого рангу;

$g$  – вектор прискорення вільного падіння, м/с<sup>2</sup>;

$\tilde{Y}_k$  – масова частка  $k$ -ї компоненти хімічної реакції;

$N$  – кількість компонент реакцій;



$\bar{J}_k = -\left(\bar{\rho}D_{m,k} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right)\nabla\tilde{Y}_k + D_{T,k}\frac{\nabla T}{T}$  – вектор дифузійного турбулентного потоку

$k$ -ї компоненти, кг/(м·с);

$D_{m,k}$  – коефіцієнт масової дифузії  $k$ -ї компоненти суміші, м<sup>2</sup>/с;

$Sc_t = \frac{\mu_t}{\rho D_t}$  – число Schmidt,  $D_t$  – коефіцієнт турбулентної дифузії, м<sup>2</sup>/с;

$D_{T,k}$  – коефіцієнт теплової дифузії  $k$ -ї компоненти суміші, кг/с;

$\bar{\omega}_k$  – джерело за рахунок середньої швидкості реакції  $k$  компоненти

$\left(\sum_{k=1}^N \bar{\omega}_k = 0\right)$ , кг/(м<sup>3</sup>·с);

$\tilde{h}_k = \int_{T_{ref,k}}^{\tilde{T}} c_{p,k} dT$  – явна ентальпія  $k$ -ї компоненти, Дж/кг;

$T$  – абсолютна температура, К;

$T_{ref,k}$  – абсолютна температура відліку, К;

$c_p$  – масова ізобарна теплоємність, Дж/(кг·К);

$\bar{\omega}_T = -\sum_{k=1}^N h_k^0(T_{ref,k})\bar{\omega}_k$  – об'ємне джерело теплоти за рахунок горіння, Вт/м<sup>3</sup>;

$\lambda$  – коефіцієнт теплопровідності, Вт/(м·К);

( $\cdot$ ) – оператор подвійного скалярного добутку;

$S_{pm}, S_{pv}, S_{ph}$  – джерельні члени, пов'язані з масою (кг/(м<sup>3</sup>·с)), об'ємною силою (Н/м<sup>3</sup>) та ентальпією (Вт/м<sup>3</sup>) частинок твердої фази, відповідно;

$S_{rad}$  – джерельний член, пов'язаний з тепловим випромінюванням,

Вт/м<sup>3</sup>;  $C_{\varepsilon 1}=1,44$ ;  $C_{\varepsilon 2}=1,92$ ;  $C_{\mu}=0,09$ ;  $\sigma_k=1,0$ ;

$\sigma_{\varepsilon}=1,3$  – коефіцієнти  $k$ - $\varepsilon$  моделі турбулентності.

Система рівнянь дискретної фази записується в Lagrange системі відліку (2) і включає два рівняння: збереження кількості руху та енергії. Траєкторії руху твердих частинок визначаються інтегруванням за псевдочасовими кроками рівняння балансу сил, що діють на частинку. Рівнянням збереження енергії твердих частинок описується конвективний та радіаційний теплообмін між частинками і рідким середовищем, теплообмін під час хімічних реакцій, видалення летких та випаровування вологи [5, 18].

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = F_D(\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) + \frac{g(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + F; \\ m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = hA_p(T_{\infty} - T_p) + f_h \frac{dm_p}{dt} h_{reac} + \varepsilon_p A_p \sigma(\theta_R^4 - T_p^4), \end{cases} \quad (2)$$

де  $\mathbf{u}$  – вектор швидкості газового середовища, м/с;

$\mathbf{u}_p$  – вектор швидкості твердих частинок м/с;

$F_D(\mathbf{u} - \mathbf{u}_p)$  – сила опору, віднесена до маси частинки, м/с<sup>2</sup>;

$$F_D = \frac{18\mu C_D \text{Re}}{\rho_p d_p^2 24}, 1/\text{с};$$

$\mu$  – динамічна в'язкість газового середовища, Па·с;

$C_D$  – безрозмірний коефіцієнт гідравлічного опору;

$\rho_p$  – густина твердих частинок; кг/м<sup>3</sup>;

$\rho$  – густина газового середовища; кг/м<sup>3</sup>;

$d_p$  – усереднений діаметр твердих частинок, м;

$$\text{Re} = \frac{\rho d_p |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}|}{\mu} \text{ – число Рейнольдса};$$

$F$  – масова сила, віднесена до маси частинки, м/с<sup>2</sup>;

$m_p$  – маса твердої частинки, кг;

$h$  – конвективний коефіцієнт теплообміну, Вт/(м<sup>2</sup>·К);

$A_p$  – площа поверхні частинки, м<sup>2</sup>;

$T_\infty$  – локальна абсолютна температура газового середовища, К;

$T_p$  – абсолютна температура твердої частинки, К;

$f_h$  – частка теплоти поверхневої реакції, що поглинається твердою частинкою;

$h_{\text{reac}}$  – теплота поверхневої реакції, Дж/кг;

$\sigma$  – стала Stefan-Boltzmann, Вт/(м<sup>2</sup>·К<sup>4</sup>);

$\varepsilon_p$  – ступінь чорноти частинки;

$\theta_R$  – радіаційна температура, К.

Зв'язок між континуальною фазою (сумішшою газів) і дискретною фазою (твердою частинкою) встановлюється за допомогою відстеження обміну масою, імпульсом та енергією [3]. Відповідні члени знаходяться в рівняннях системи (1).

Повна швидкість поверхневих реакцій на частинках твердої фази згідно з моделлю множинних поверхневих реакцій складається з об'ємної швидкості дифузної і кінетичної швидкості хімічної реакції. Для хімічних реакцій першого порядку повна швидкість  $i$ -ї реакції визначається за формулою [5]

$$\frac{1}{R_i} = \frac{1}{R_{i,d}} + \frac{1}{R_{i,k}} \rightarrow R_i = \frac{R_{i,d} R_{i,k}}{R_{i,d} + R_{i,k}}, \quad (3)$$

$$\text{де } R_{i,d} = C_i \frac{\left[ \frac{(T_p + T_\infty)}{2} \right]^{0.75}}{d_p} p_i \text{ – швидкість дифузії } i\text{-ї реакції, кг/(м}^2\text{·с);}$$

$C_i$  – коефіцієнт дифузії  $i$ -ї реакції, кг/(м<sup>2</sup>·с·К<sup>0.75</sup>·Па);

$p_i$  – парціальний тиск газового реагенту  $i$ -ї реакції, Па;

$R_{i,k}$  – явна кінетична швидкість  $i$ -ї реакції (рівняння Arrhenius з врахуванням тиску), кг/(м<sup>2</sup>·с);

$A_k$  – передекспоненціальний множник (стеричний фактор)  $i$ -ї реакції, кг/(м<sup>2</sup>·с·К <sup>$\beta$</sup> ·Па <sup>$m$</sup> );

$E_a$  – енергія активації, Дж/кмоль;

$R$  – універсальна газова стала, Дж/(кмоль·К).

Явна кінетична швидкість  $i$ -ї реакції визначається за формулою

$$R_{i,k} = A_i T_p^\beta \exp\left(-\frac{E_a}{RT_p}\right) \left(\frac{P_i}{10^5}\right)^m, \quad (4)$$

де  $\beta$ ,  $m$  – показники степеня.

Швидкість витрати  $j$ -ї компоненти  $i$ -ї реакції на поверхні твердої частинки визначається за формулою [18]

$$\bar{R}_i = A_p \eta Y_j R_i, \quad (5)$$

де  $Y_j$  – масова частка поверхневих компонентів  $j$  у частинці;  $\eta$  – коефіцієнт ефективності.

У системі рівнянь (2) крім процесів спалювання та газифікації також можна враховувати випаровування води й видалення летких з частинок твердої фази [18].

Для опису взаємодії між кінетикою хімічних реакцій і турбулентністю потоків використовується модель кінцевої швидкості або вихрової дисипації за залежністю [3, 18]

$$R = \min\left[R_{ch}, R_{mix}(k, \varepsilon, X_R, X_P)\right], \quad (6)$$

де  $R_{ch}$  – швидкість хімічної реакції за законом Арреніуса;

$R_{mix}$  – швидкість турбулентного перемішування;

$k$  – турбулентна кінетична енергія;

$\varepsilon$  – швидкість дисипації турбулентної енергії;

$X_R$  – мольна концентрація реагенту реакції;  $X_P$  – мольна концентрація продукту реакції.

Для опису процесу газифікації частинок термообробленого нафтового коксу використовується чотири гетерогенні та дев'ять гомогенних реакцій [18]. Глобальні гетерогенні (поверхневі) реакції включають реакції згоряння напівкоксу, а також газифікації  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  і  $\text{H}_2$  [5, 18] (табл. 1). Глобальні гомогенні (об'ємні) реакції процесу газифікації наведено в табл. 2.

Таблиця 1  
Кінетичні коефіцієнти гетерогенних реакцій

№	Реакція	Порядок реакції	A	$E_a$ , Дж/кмоль	$m$	Посилання
1	$C_{<s>} + 0.5 O_2 \rightarrow CO$	$[C_{<s>}]^0 [O_2]^1 (1)$	$300 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{Па}^{0.65})$	$1.3 \cdot 10^8$	0.65	[5], [18]
			$4.54 \cdot 10^{-7} \text{ Па}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$	$1.105 \cdot 10^8$	0	[10]
			$8.71 \text{ м}/(\text{с} \cdot \text{К})$	$1.49 \cdot 10^8$	–	[2]
2	$C_{<s>} + CO_2 \rightarrow 2CO$	$[C_{<s>}]^0 [CO_2]^1 (1)$	$2224 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{Па}^{0.6})$	$2.2 \cdot 10^8$	0.6	[5], [18]
			$3.92 \text{ Па}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$	$2.239 \cdot 10^8$	0	[10]
			$4.4 \text{ м}/(\text{с} \cdot \text{К})$	$1.62 \cdot 10^8$	–	[2]
3	$C_{<s>} + H_2O \rightarrow CO + H_2$	$[C_{<s>}]^0 [H_2O]^1 (1)$	$42.5 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{Па}^{0.4})$	$1.42 \cdot 10^8$	0.4	[5], [18]
			$5.95 \cdot 10^{-5} \text{ Па}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$	$1.135 \cdot 10^8$	0	[10]
			$1.33 \text{ м}/(\text{с} \cdot \text{К})$	$1.47 \cdot 10^8$	–	[2]
4	$C_{<s>} + 2H_2 \rightarrow CH_4$	$[C_{<s>}]^0 [H_2]^1 (1)$	$1.62 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{Па})$	$1.5 \cdot 10^8$	1	[5], [18]
			$8.25 \cdot 10^{-9} \text{ Па}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$	$6.716 \cdot 10^7$	0	[10]
			$0.12 \text{ м}/(\text{с} \cdot \text{К})$	$1.49 \cdot 10^8$	–	[2]

Як видно з табл. 1, 2, коефіцієнти гетерогенних і гомогенних реакцій газифікації різняться між собою як значенням, так і іноді розмірністю, що ускладнює їх використання у практичних розрахунках.

Таблиця 2  
Кінетичні коефіцієнти гомогенних реакцій

N o	Реакція	Порядок реакції	A	$E_a$ , Дж/кмоль	$\beta$	Поси- лання
1	$\text{Vol}+1.706$ $\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 +$ $\text{N}_2 + 1.543$ $\text{H}_2\text{O}$	(1.5)	$2.119 \cdot 10^{11} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.5} \text{с}^{-1}$	$2.027 \cdot 10^8$	0	[18]
2	$\text{CO} + 0.5\text{O}_2$ $\rightarrow \text{CO}_2$	$[\text{CO}]^1 [\text{O}_2]^{0.25}$ $[\text{H}_2\text{O}]^{0.5} (1.75)$	$2.239 \cdot 10^{12} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.75} \text{с}^{-1}$	$1.7 \cdot 10^8$	0	[18]
		$[\text{CO}]^1 [\text{O}_2]^{0.25}$ $[\text{H}_2\text{O}]^{0.5} (1.75)$	$2.239 \cdot 10^{12} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.75} \text{с}^{-1}$	$1.674 \cdot 10^8$	0	[22]
		$[\text{CO}]^1 [\text{O}_2]^{0.25}$ $[\text{H}_2\text{O}]^{0.5} (1.75)$	$2.239 \cdot 10^{12} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.75} \text{с}^{-1}$	$1.674 \cdot 10^8$	0	[7]
		$[\text{CO}]^1 [\text{O}_2]^{0.5}$ $[\text{H}_2\text{O}]^{0.5} (2)$	$1.3 \cdot 10^{11} (\text{м}^3/\text{кмоль}) \text{с}^{-1}$	$1.255 \cdot 10^8$	0	[9]
		$[\text{CO}]^1 [\text{O}_2]^{0.25}$ (1.25)	$1.237 \cdot 10^{10} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.25} \text{с}^{-1}$	$1.67 \cdot 10^8$	0	[10]
		$[\text{CO}]^1 [\text{O}_2]^{0.25}$ $[\text{H}_2\text{O}]^{0.5} (1.75)$	$3.98 \cdot 10^8 (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.75} \text{с}^{-1}$	$4.18 \cdot 10^7$	0	[23]
3	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$ $\rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	$[\text{CO}]^{0.5} [\text{H}_2\text{O}]^1$ (1.5)	$2.35 \cdot 10^{10} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.5} \text{с}^{-1}$	$2.88 \cdot 10^8$	0	[18]
		$[\text{CO}]^1 [\text{H}_2\text{O}]^1 (2)$	$2.78 \cdot 10^3 (\text{м}^3/\text{кмоль}) \text{с}^{-1}$	$1.257 \cdot 10^7$	0	[10]
4	$\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightarrow$ $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	$[\text{CO}_2]^1 [\text{H}_2]^{0.5} (1.5)$	$1.785 \cdot 10^{12} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.5} \text{с}^{-1}$	$3.26 \cdot 10^8$	0	[18]
		$[\text{CO}_2]^1 [\text{H}_2]^1 (2)$	$1.049 \cdot 10^8 (\text{м}^3/\text{кмоль}) \text{с}^{-1}$	$4.545 \cdot 10^7$	0	[10]
5	$\text{H}_2 + 0.5\text{O}_2$ $\rightarrow \text{H}_2\text{O}$	$[\text{H}_2]^1 [\text{O}_2]^1 (2)$	$9.87 \cdot 10^8 (\text{м}^3/\text{кмоль}) \text{с}^{-1}$	$3.1 \cdot 10^7$	0	[18]
		$[\text{H}_2]^1 [\text{O}_2]^1 (2)$	$1.08 \cdot 10^{13} (\text{м}^3/\text{кмоль}) \text{с}^{-1}$	$1.264 \cdot 10^8$	0	[9]
		$[\text{H}_2]^1 [\text{O}_2]^1 (2)$	$1.08 \cdot 10^{13} (\text{м}^3/\text{кмоль}) \text{с}^{-1}$	$1.255 \cdot 10^8$	0	[7]
		$[\text{H}_2]^1 [\text{O}_2]^{0.5} (1.5)$	$1.631 \cdot 10^{12} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.5} \text{с}^{-1}$	$2.852 \cdot 10^7$	-1.5	[10]
		$[\text{H}_2]^{0.25} [\text{O}_2]^{1.5}$ (1.75)	$5.0 \cdot 10^{20} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.75} \text{с}^{-1}$	$1.25 \cdot 10^8$	-1	[23]
6	$\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2 +$ $0.5\text{O}_2$	$[\text{H}_2\text{O}]^1 (1)$	$2.06 \cdot 10^{11} \text{с}^{-1}$	$2.78 \cdot 10^8$	0	[18]
		$[\text{H}_2]^{-0.75} [\text{O}_2]^1$ $[\text{H}_2\text{O}]^1 (1.25)$	$2.93 \cdot 10^{20} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.25} \text{с}^{-1}$	$4.09 \cdot 10^8$	- 0.88	[23]
7	$\text{CH}_4 + 1.5\text{O}_2$ $\rightarrow \text{CO} + 2$ $\text{H}_2\text{O}$	$[\text{CH}_4]^{0.7} [\text{O}_2]^{0.8}$ (1.5)	$5.012 \cdot 10^{11} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.5} \text{с}^{-1}$	$2.0 \cdot 10^8$	0	[18]
		$[\text{CH}_4]^{0.7} [\text{O}_2]^{0.8}$ (1.5)	$5.01 \cdot 10^{11} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.5} \text{с}^{-1}$	$2.012 \cdot 10^8$	0	[9]
		$[\text{CH}_4]^{0.7} [\text{O}_2]^{0.8}$ (1.5)	$1.613 \cdot 10^{13} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.5} \text{с}^{-1}$	$2.0 \cdot 10^8$	0	[10]
		$[\text{CH}_4]^{0.7} [\text{O}_2]^{0.8}$ (1.5)	$1.59 \cdot 10^{13} (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.5} \text{с}^{-1}$	$1.998 \cdot 10^8$	0	[23]
8	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}$ $\rightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2$	$[\text{CH}_4]^{0.5} [\text{H}_2\text{O}]^1$ (1.5)	$5.922 \cdot 10^8 (\text{м}^3/\text{кмоль})^{0.5} \text{с}^{-1}$	$2.09 \cdot 10^8$	0	[18]
		$[\text{CH}_4]^1 [\text{H}_2\text{O}]^1 (2)$	$3.1 \cdot 10^8 (\text{м}^3/\text{кмоль}) \text{с}^{-1}$	$1.247 \cdot 10^8$	0	[10]
		$[\text{CH}_4]^1 [\text{H}_2\text{O}]^1 (2)$	$3.1 \cdot 10^{11} (\text{м}^3/\text{кмоль}) \text{с}^{-1}$	$1.25 \cdot 10^8$	0	[23]
9	$\text{CO} + 3\text{H}_2$ $\rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}$	$[\text{CO}]^1 [\text{H}_2]^2 (3)$	$1.16798 \cdot 10^{16} (\text{м}^3/\text{кмоль})^2 \text{с}^{-1}$	$3.9824 \cdot 10^8$	0	[10]

## 5. Числова модель процесу газифікації сипкого вуглецевмісного матеріалу

Для числової реалізації математичної моделі процесу газифікації у барабані-охолоджувачі застосовано програмне забезпечення ANSYS Fluent [18]. При цьому для моделювання турбулентних потоків використано realizable  $k-\epsilon$  модель, а для теплового випромінювання – discrete ordinates method (DOM). Кінетичні коефіцієнти гетерогенних реакцій приймаються за даними [5, 18], а гомогенних – за даними [10, 18].

З метою мінімізації вимог до обчислювальних ресурсів числову модель процесу газифікації пилової фракції вуглецевмісного наповнювача в барабані-охолоджувачі обертової печі побудовано на базі вісесиметричної постановки. Схему типів граничних умов (ГУ) вісесиметричної задачі газифікації наведено на рис. 1.

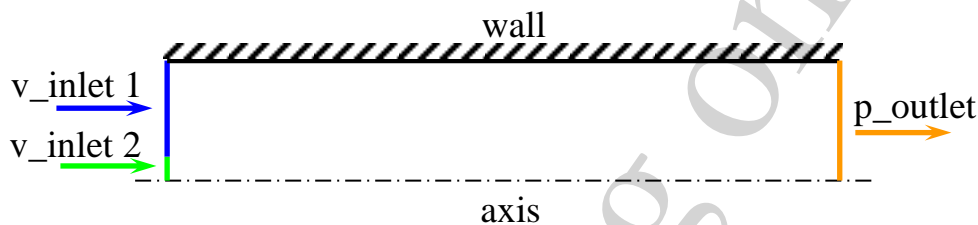


Рис. 1. Схема типів ГУ числової моделі газифікації вуглецевмісного наповнювача в барабані-охолоджувачі у вісесиметричному формулюванні: axis – вісь симетрії барабана; wall – тверда стінка; v\_inlet 1, v\_inlet 2 (velocity inlet) – вхід потоків за заданою швидкістю; p\_outlet (pressure outlet) – вихід потоку; розміри барабана: діаметр 1400 мм, довжина 23000 мм

Згідно зі схемою (рис. 1), параметри ГУ числової моделі газифікації розглядалися такими:

– на v\_inlet 1 задавався потік повітря сильно розбавлений гарячими відхідними газами обертової печі й водяною парою хімічним складом ( $O_2=0,07$ ;  $CO_2=0,05$ ;  $H_2O=0,15$ ;  $CO=0,08$  (мас.)) з дискретною зміною осьової швидкості  $v_1=(0,25; 0,5; 0,75; 1,0; 1,25; 1,5)$  м/с, температурою  $T_1=853$  К і ступенем чорноти границі  $\epsilon_1=1$ ;

– на v\_inlet 2 задавався потік повітря з додаванням водяної пари хімічним складом ( $O_2=0,15$ ;  $CO_2=0,0$ ;  $H_2O=0,25$ ;  $CO=0,0$  (мас.)) з осьовою швидкістю  $v_2=2,5$  м/с, температурою  $T_2=473$  К і ступенем чорноти границі  $\epsilon_2=1$ ;

– на v\_inlet 2 також задавався потік дискретної фази (пилової фракції вуглецевмісного наповнювача еквівалентним діаметром (100–300) мкм), з осьовою і радіальною швидкістю  $v_{axD}=2,5$  м/с і  $v_{rD}=1,5$  м/с відповідно, температурою  $T_D=300$  К;

– на p\_outlet задавалися тиск  $p_{outlet}=0$  Па і температура  $T_{outlet}=800$  К зворотного потоку повітря з хімічним складом ( $O_2=0,23$  (мас.)), ступінь чорноти границі  $\epsilon_{outlet}=1$ ;

– на wall задавалися умови прилипання для газового потоку, ступінь чорноти границі  $\epsilon_{wall}=0,8$  і ГУ для рівняння енергії двох типів:

перший тип – задано ГУ I роду (рис. 2), який включає змінну ізотермічну зону з  $T_{wall}=1253$  К і зону охолодження з лінійним законом зміни температури від 1253 К до 473 К;

другий тип – задано ГУ конвективного типу (III роду) з врахуванням шару шамотного вогнетриву товщиною 50 мм, за допомогою яких також моделюється гаряча зона (наближена до ізотермічної) завдовжки 11,5 м.

У разі задання ГУ I роду  $T_{wall}$  визначається температурою термообробленого сипкого вуглецевмісного матеріалу, який надходить у барабан-охолоджувач з обертової печі.

Для ГУ III роду задається гаряча зона з температурою оточуючого середовища  $T_{env}=1453$  К і коефіцієнтом тепловіддачі  $\alpha_{env}=1000$  Вт/(м<sup>2</sup>·К) та зона водяного зрошувального охолодження з  $T_{env}=300$  К і  $\alpha_{env}=1000$  Вт/(м<sup>2</sup>·К).

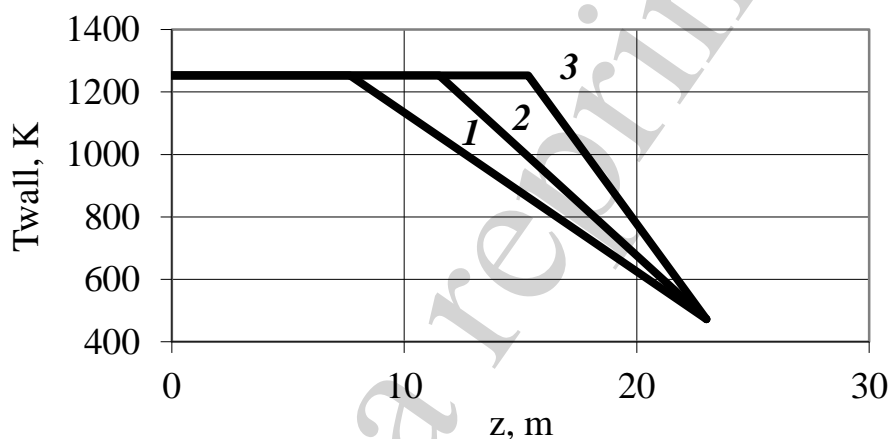


Рис. 2. Зміна розподілу температури по довжині внутрішньої поверхні барабана-охолоджувача (границя wall на рис. 1): 1 – довжина ізотермічної зони 7,67 м; 2 – 11,5 м; 3 – 15,33 м

Газове середовище в числовій моделі вважалось «сірим», а коефіцієнти його поглинання й розсіювання приймалися рівними між собою і дорівнювали 5 м<sup>-1</sup>, показник заломлення брався рівним 1.

Фізичні властивості пилової фракції вуглецевмісного наповнювача задавалися такими: істинна густина 1780 кг/м<sup>3</sup>; масова ізобарна теплоємність 1000 Дж/(кг·К); частка горючої складової 90 % (за мас.); частка летких 2 % (за мас.); частка води 4 % (за мас.).

Теплофізичні властивості шамотного вогнетриву приймалися такими: густина 1600 кг/м<sup>3</sup>; коефіцієнт теплопровідності 1,5 Вт/(м·К); масова ізобарна теплоємність 800 Дж/(кг·К).

Метод розв'язання – Pressure-Velocity Coupling з першим порядком апроксимації конвективних членів рівнянь системи (1).

Варіантні розрахунки за описаною числовою моделлю виконувалися з використанням псевдонестационарного розв'язувача (Pseudo Transient) та авто-

матичним вибором кроку інтегрування за часом. Для отримання усталеного розв'язку за температурних граничних умов (ГУ I роду) на внутрішній поверхні барабана-охолоджувача необхідно було виконати 3780 кроків за часом, а за ГУ конвективного типу (ГУ III роду) – біля 7560.

Збіжність числового розв'язку задачі газифікації за кроком сітки виконувалася методом подвійного перерахунку. Встановлено, що розрахункова сітка, яка включає 73620 комірок і 75202 вузлів, призводить до похибки визначення основних параметрів моделі не більше 1–2 %.

Для візуалізації результатів розрахунків фізичних полів за допомогою програмного продукту ANSYS Fluent використано вільно відкритий програмний код ParaView [24].

## **6. Обґрунтування доцільності процесу газифікації вуглецевмісного наповнювача в барабані-охолоджувачі обертової печі. Верифікація числової моделі**

За розробленою числовою моделлю процесу газифікації пилової фракції вуглецевмісного наповнювача в барабані-охолоджувачі обертової печі проведено серію розрахунків з метою дослідження впливу таких параметрів:

- зміни співвідношення окиснювач/вуглець ( $O_2/C$ );
- довжини ізотермічної зони, типу граничних умов;
- наявності шару вогнетриву тощо.

За результатами цих розрахунків визначалися підсумкові значення масових часток  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $CO$  і  $H_2O$  на вході в барабан-охолоджувач обертової печі. Ці величини разом із температурою та тиском потрібні для виконання порівняльних розрахунків процесу газифікації з використанням програмного забезпечення CEA NASA [20] у наближенні рівноважної хімії. При цьому також за підсумковим значенням масової витрати окиснювача й пилової фракції вуглецевмісного наповнювача на вході в барабан-охолоджувач обчислювалося співвідношення  $O_2/C$ .

До основних горючих газів синтез-газу належать монооксид вуглецю, водень і незначна частка метану. Саме тому порівняння розрахунків, виконаних за допомогою програм Fluent і CEA виконувалися за вказаними компонентами синтез-газу, включаючи  $CO_2$ .

Результати порівняння розрахунків процесу газифікації пилової фракції вуглецевмісного наповнювача в барабані-охолоджувачі на його виході за граничних умов I роду і довжини ізотермічної зони 11,5 м за різного значення співвідношення  $O_2/C$  наведено на рис. 3–5.

Як видно з рис. 3–5, результати розрахунків кількісного складу синтез-газу на виході з барабана-охолоджувача для довжини ізотермічної зони 11,5 м за різними програмами в цілому збігаються між собою. Найменша різниця між молярними частками  $CO$  і  $H_2$  спостерігається для співвідношення  $O_2/C=(42,7–51,6)$  % і перебуває в межах (3,6–5,8) %. Подібна збіжність також спостерігається і для довжини ізотермічної зони барабана-охолоджувача 7,67 м і 15,3 м.

Порівняння залежностей молярних часток компонентів синтез-газу на виході з барабана-охолоджувача обертової печі залежно від співвідношення  $O_2/C$



для граничних умов I роду наведено на рис. 6. Зазначені залежності отримано за допомогою програмних продуктів Fluent і CEA.

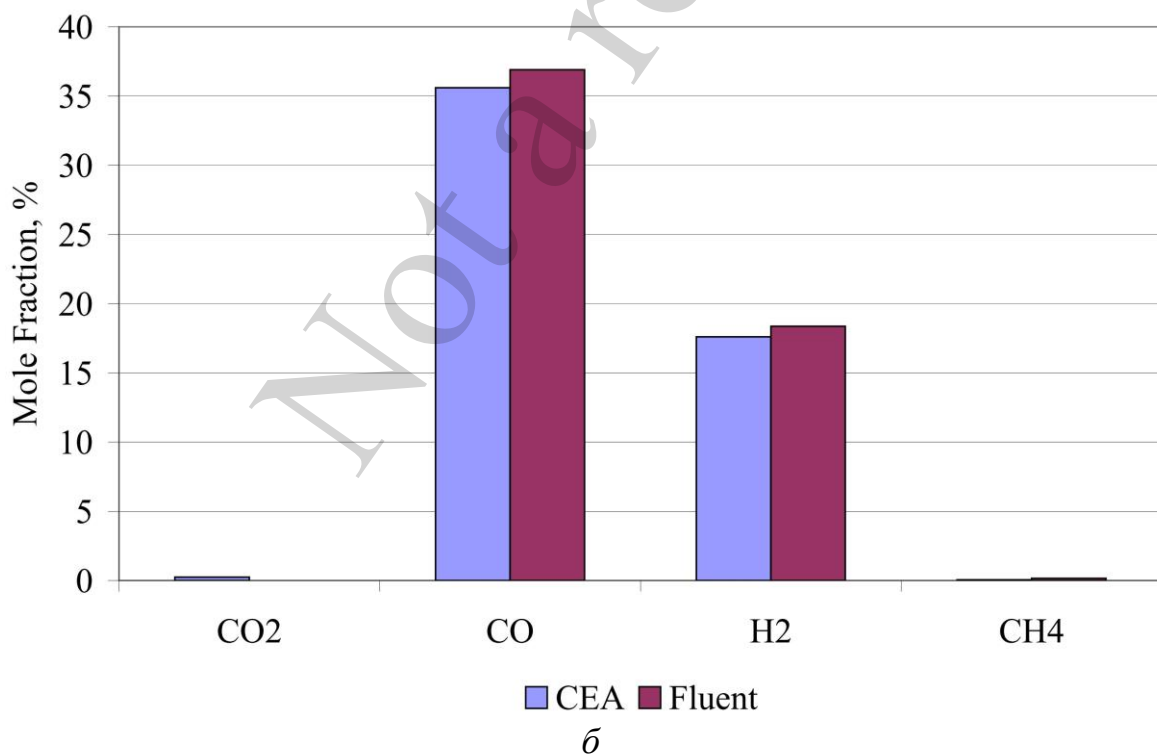
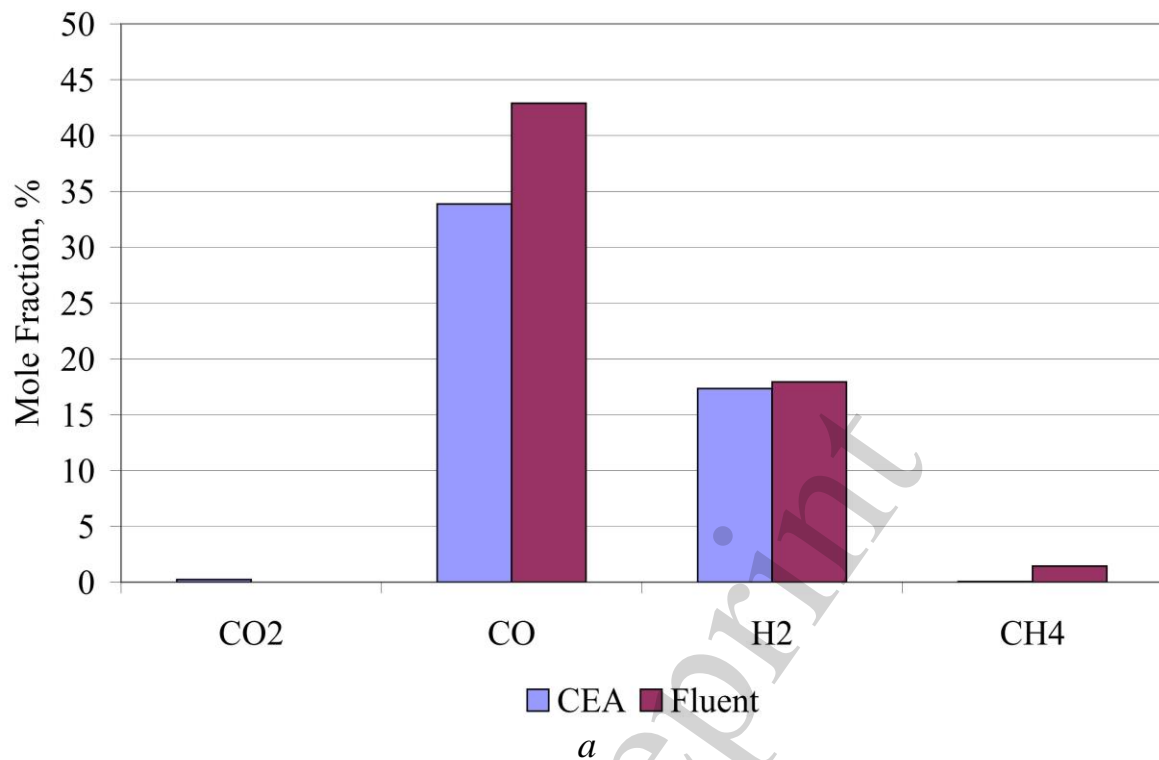


Рис. 3. Порівняння кількісного складу синтез-газу на виході з барабана-охолоджувача обертової печі за граничних умов I роду і довжини ізотермічної зони 11,5 м за різного значення співвідношення  $O_2/C$ , отриманого з використанням програмних продуктів Fluent і CEA: *a* –  $O_2/C=37,2$  % (мас./мас.); *б* –  $O_2/C=42,7$  %

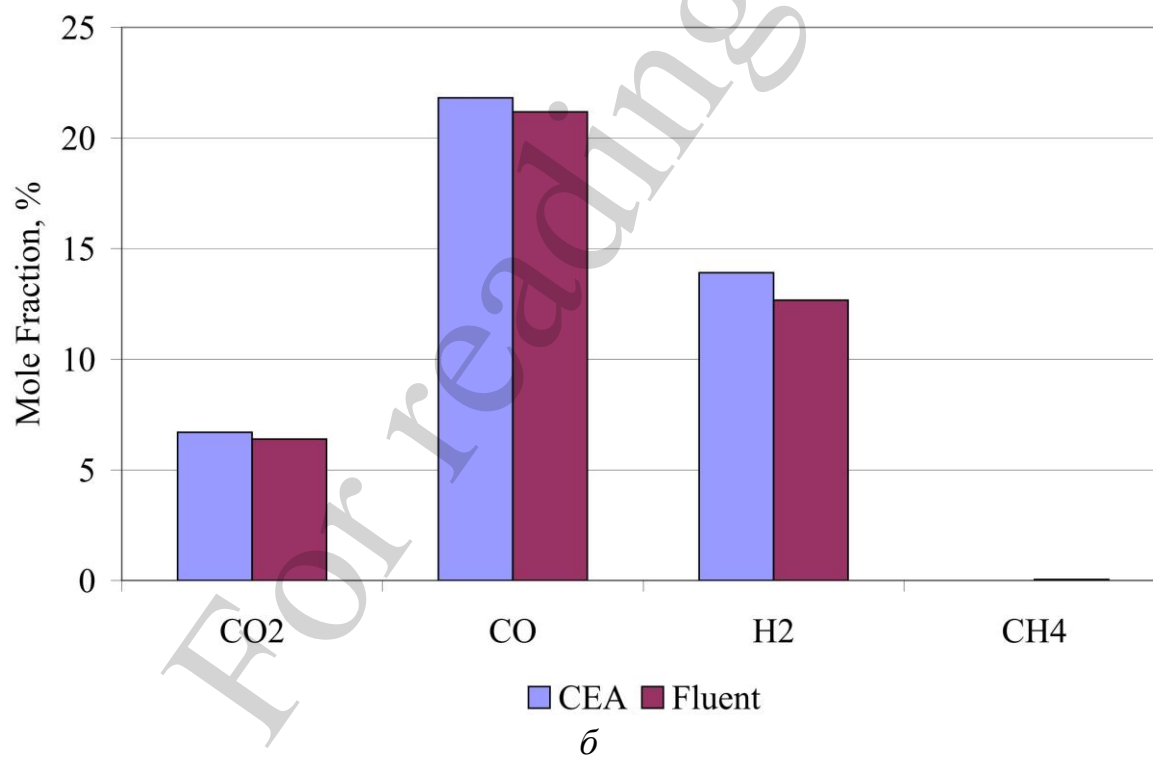
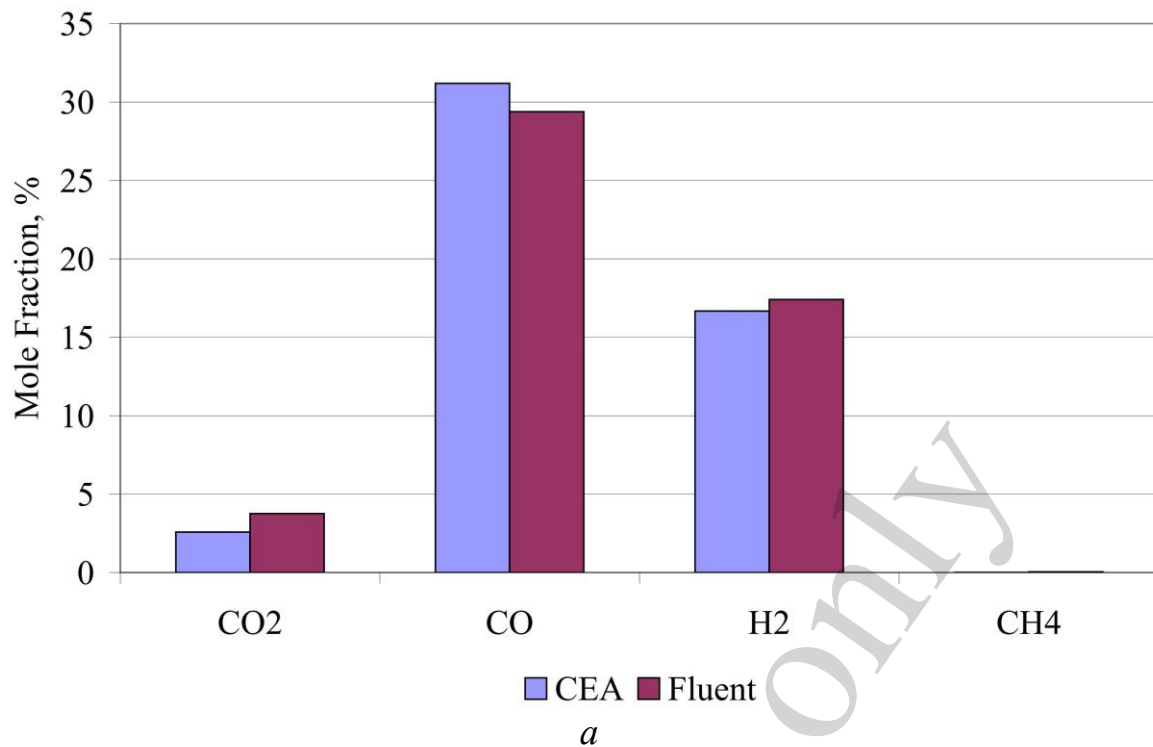


Рис. 4. Порівняння кількісного складу синтез-газу на виході з барабана-охолоджувача обертової печі за граничних умов I роду і довжини ізотермічної зони 11,5 м за різного значення співвідношення O<sub>2</sub>/C, отриманого з використанням програмних продуктів Fluent і CEA: а – O<sub>2</sub>/C=51,6 % (мас./мас.); б – O<sub>2</sub>/C=70,7 %

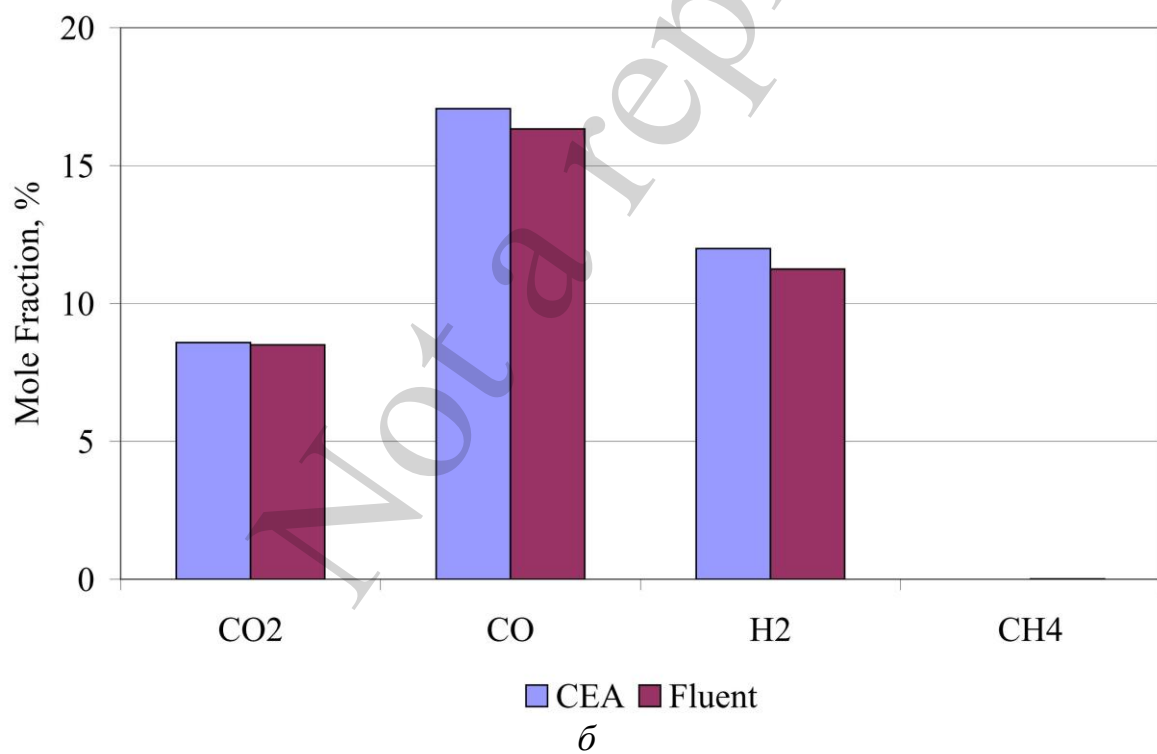
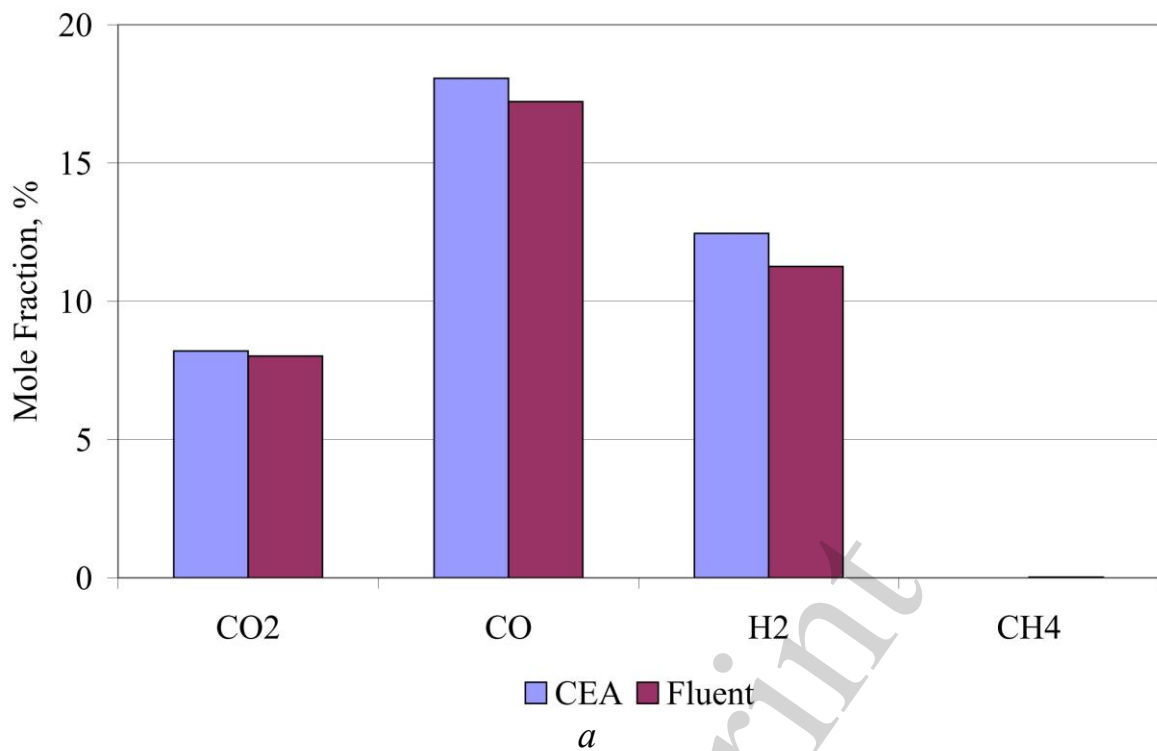


Рис. 5. Порівняння кількісного складу синтез-газу на виході з барабана-охолоджувача обертової печі за граничних умов I роду і довжини ізотермічної зони 11,5 м за різного значення співвідношення  $O_2/C$ , отриманого з використанням програмних продуктів Fluent і CEA: а –  $O_2/C=82,7\%$  (мас./мас.); б –  $O_2/C=86,5\%$

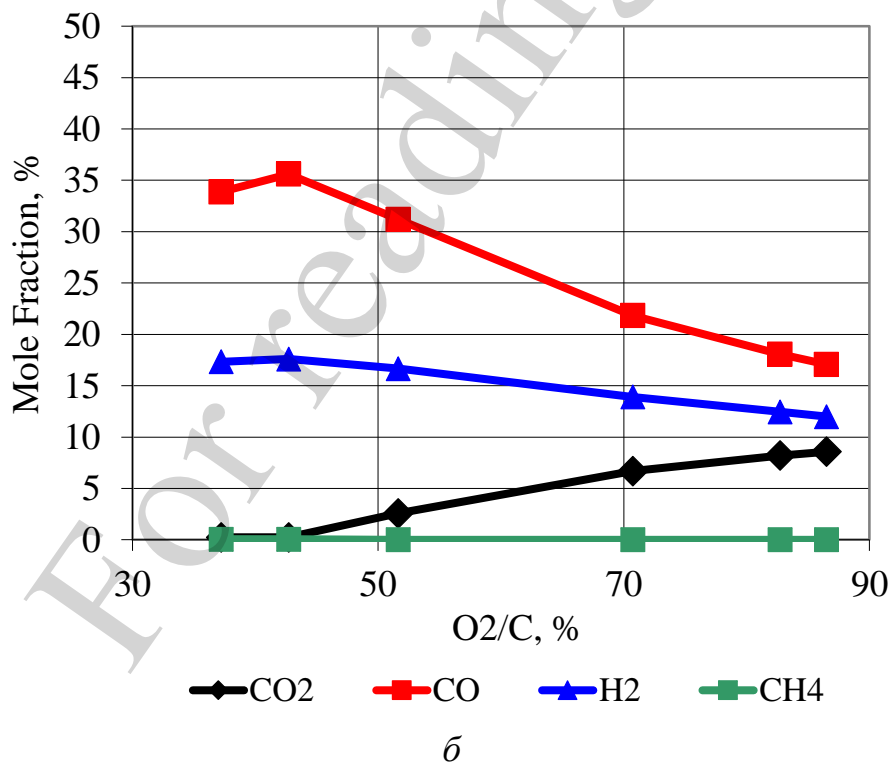
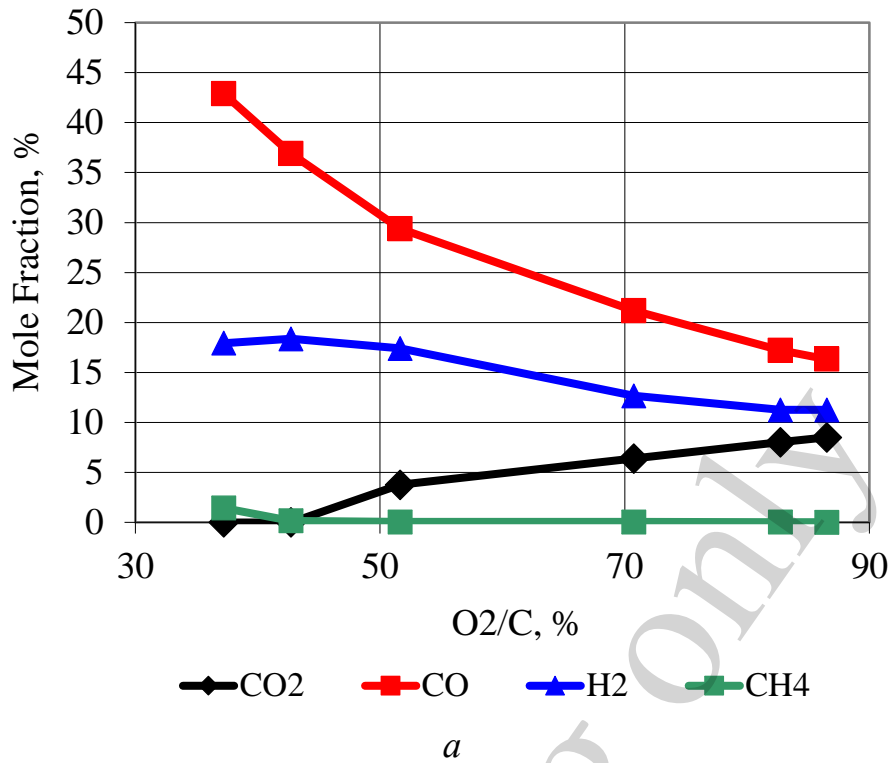


Рис. 6. Залежність молярних часток компонентів синтез-газу на виході з барабана-охолоджувача обертової печі від співвідношення O<sub>2</sub>/C за граничних умов I роду і довжини ізотермічної зони 11,5 м: *a* – Fluent; *б* – SEA

За результатами розрахунків з використання співвідношень рівноважної хімії (рис. 6, б) максимум молярних часток CO і H<sub>2</sub> у синтез-газі спостерігається для

співвідношення  $O_2/C=42,7\%$ . У той час як за розрахунками Fluent за однакових умов екстремум має місце тільки для молярної частки  $H_2$  (рис. 6, *a*). Зі збільшенням значення  $O_2/C$  молярні частки горючих складових у синтез-газі зменшуються.

Результати розрахунків фізичних полів під час процесу газифікації пилової фракції вуглецевмісного наповнювача за граничних умов I роду, виконаних з використанням Fluent, наведено на рис. 7, 8.

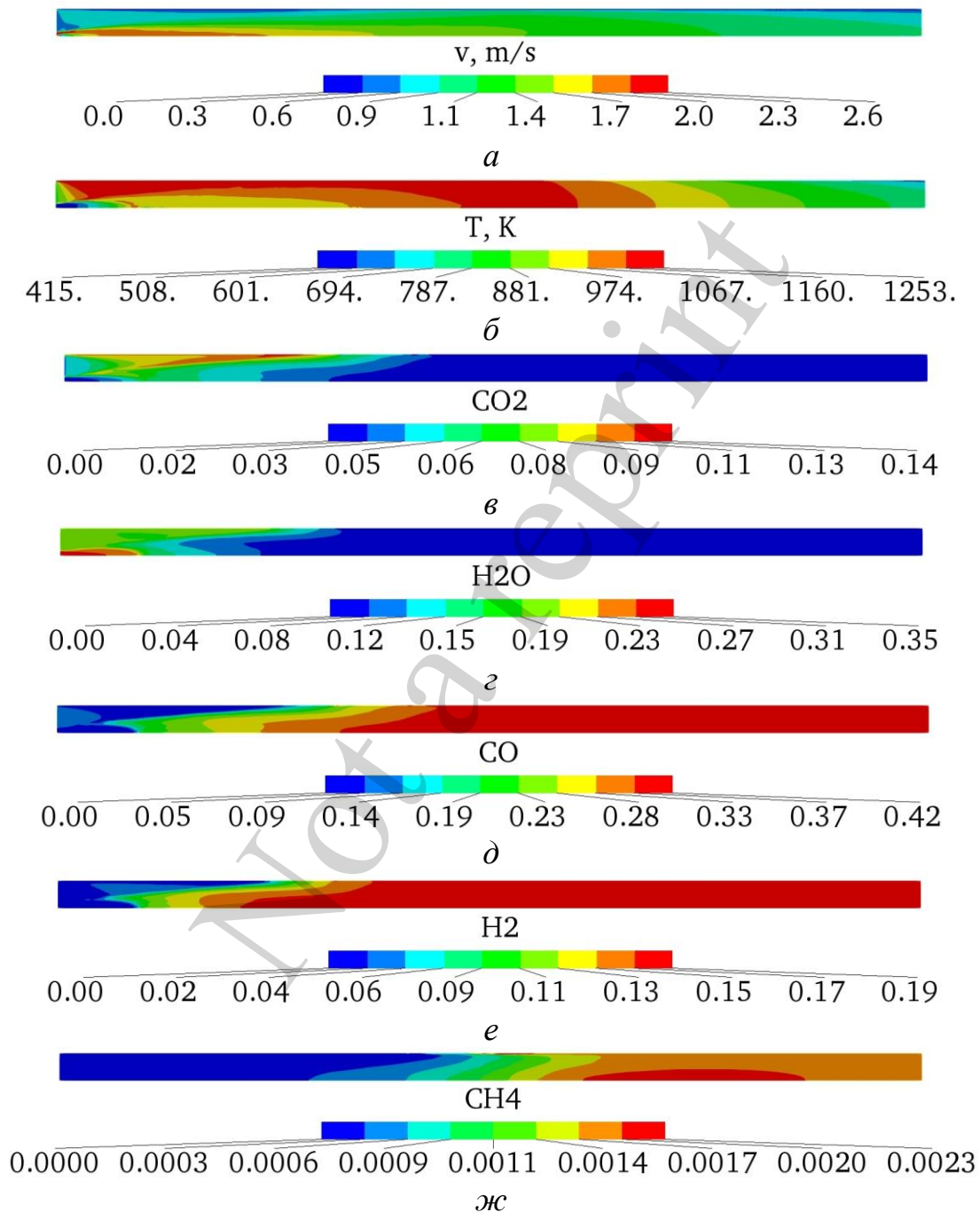


Рис. 7. Фізичні поля під час процесу газифікації пилової фракції вуглецевмісного наповнювача за граничних умов I роду, довжини ізотермічної зони барабана 11,5 м і співвідношення  $O_2/C=42,7\%$ : *a* – швидкість; *б* – температура; *в* – молярна частка  $CO_2$ ; *г* – молярна частка  $H_2O$ ; *д* – молярна частка  $CO$ ; *е* – молярна частка  $H_2$ ; *ж* – молярна частка  $CH_4$

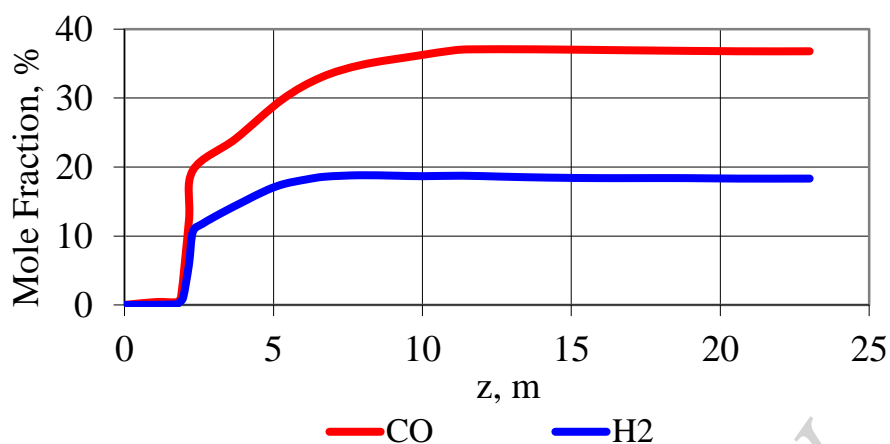


Рис. 8. Розподіл молярних часток основних горючих складових синтез-газу CO і H<sub>2</sub> по осі барабана-охолоджувача граничних умов I роду, довжини ізотермічної зони барабана 11,5 м і співвідношення O<sub>2</sub>/C=42,7 %

З рис. 7, 8 чітко видно, що максимальні значення молярних часток горючих складових синтез-газу, спостерігаються в основному в зоні охолодження та у вихідній частині барабана, а негорючих, навпаки – мінімальні. За даними проведених розрахунків продуктивність барабана-охолоджувача за синтез-газом за співвідношенням O<sub>2</sub>/C=42,7 % складає за нормальних умов 1509 м<sup>3</sup>/год.

Залежність молярних часток основних горючих складових синтез-газу від довжини ізотермічної зони барабана-охолоджувача, отриманих із використанням програмних продуктів Fluent і CEA, наведено на рис. 9.

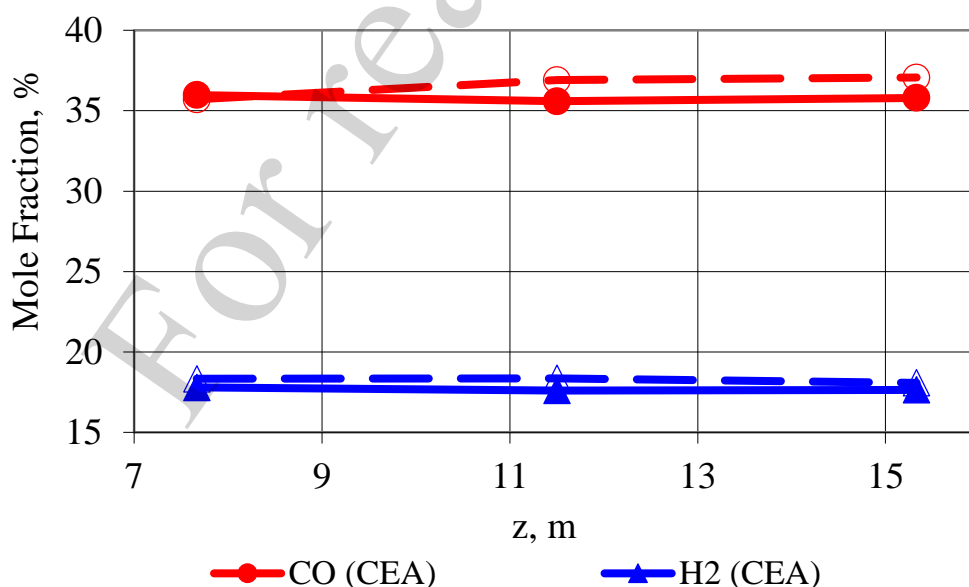


Рис. 9. Залежність молярних часток CO і H<sub>2</sub> синтез-газу від довжини ізотермічної зони барабана-охолоджувача для співвідношення O<sub>2</sub>/C=(42,4–44,2) % (мас./мас.) за максимального виходу H<sub>2</sub> і мінімальних концентрацій CO<sub>2</sub>≈0 % та H<sub>2</sub>O≈0 % за результатами розрахунків Fluent і CEA

Графіки на рис. 9 показують, що результати, отримані з використанням різних програм, добре кореспондуються між собою. При цьому значення молярних часток основних горючих складових синтез-газу майже не залежать від довжини ізотермічної зони барабана-охолоджувача.

Результати розрахунків процесу газифікації пилової фракції вуглецевмісного наповнювача в барабані-охолоджувачі за ГУ конвективного типу з врахуванням шару шамотного вогнетриву на барабані наведено на рис. 10–13.

Результати варіантних розрахунків за ГУ конвективного типу показали, що у разі збільшення довжини гарячої зони барабана-охолоджувача температура синтез-газу на виході з нього значно зростає. Це також викликає підвищення температури сипкого матеріалу, а її зменшення – призводить до значного падіння температури процесу газифікації та відповідно виходу горючих складових синтез-газу.

Визначальний вплив на процес газифікації в барабані-охолоджувачі відіграє температура термообробленого сипкого матеріалу, що надходить з обертової печі. Для підвищення ефективності використання теплоти матеріалу, що надходить з обертової печі, товщина вогнетриву в гарячій (реакційній) зоні барабана-охолоджувача має бути більшою, ніж у зоні його зрошувального охолодження.

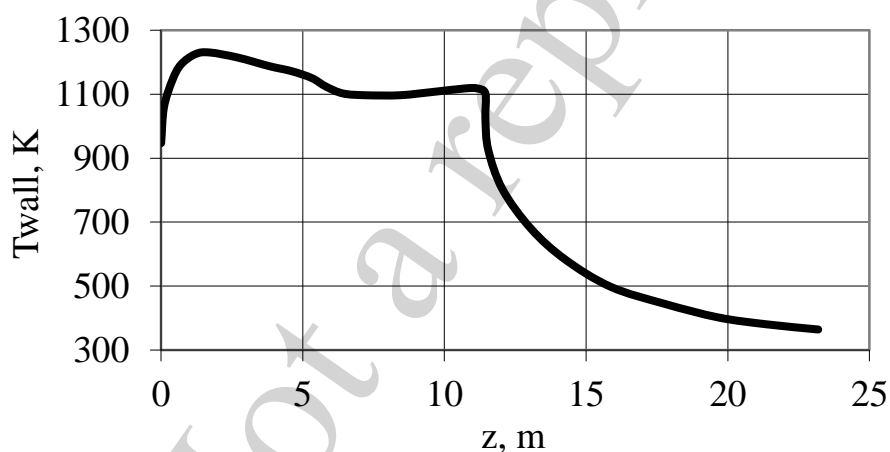
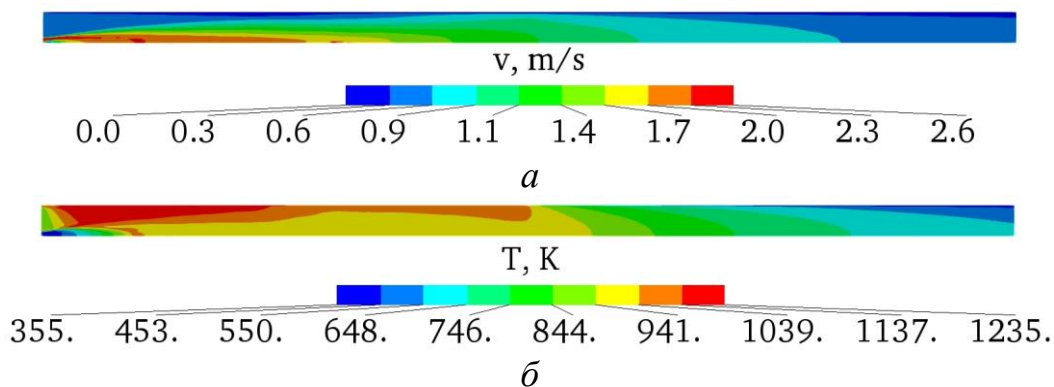


Рис. 10. Температура на внутрішній поверхні вогнетривкої стінки барабана-охолоджувача товщиною 50 мм залежно від його довжини (довжина гарячої зони барабана становить 11,5 м)



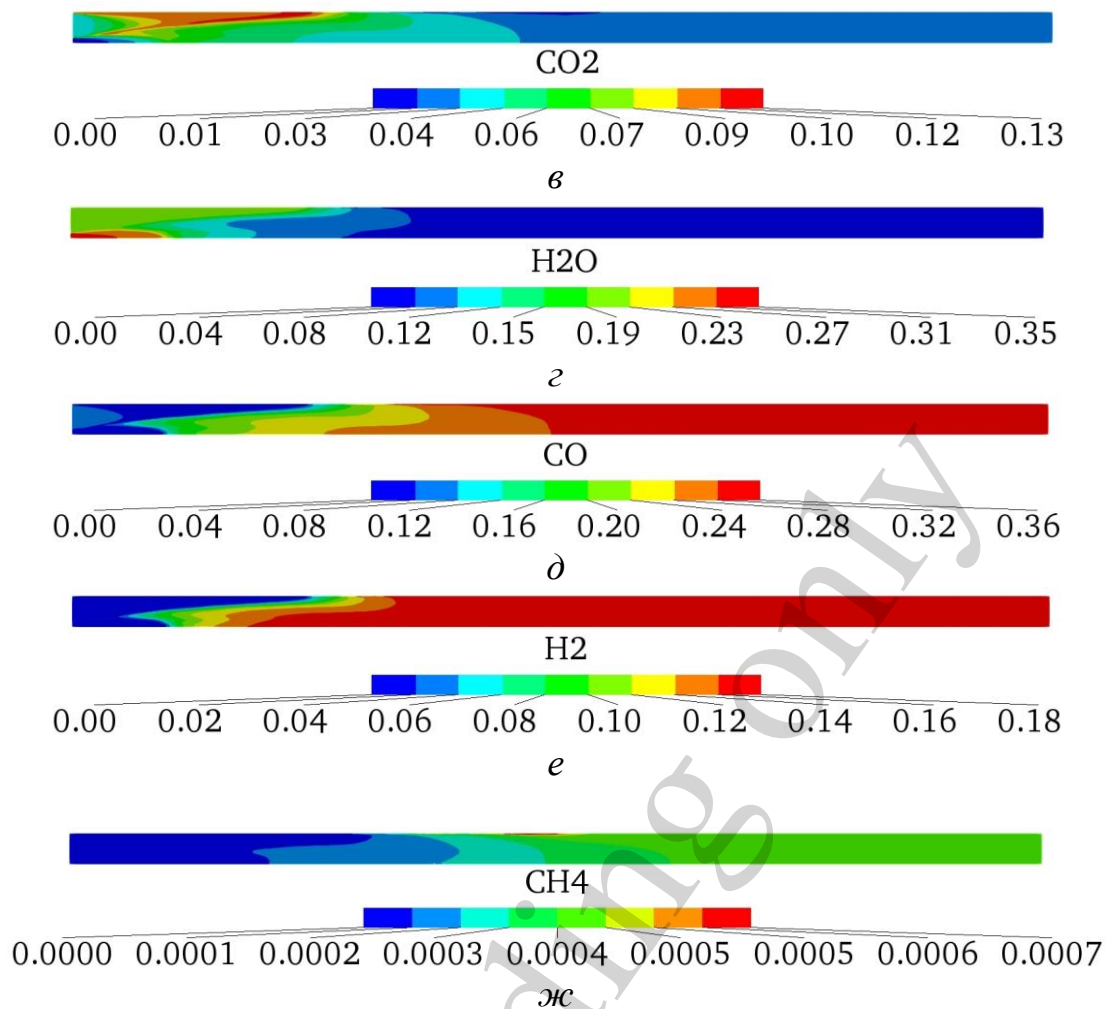


Рис. 11. Фізичні поля під час процесу газифікації пилової фракції вуглецевмісного наповнювача за граничних умов III роду, довжини ізотермічної зони барабана 11,5 м і співвідношення  $O_2/C=48,5\%$ : *a* – швидкість; *b* – температура; *v* – молярна частка  $CO_2$ ; *z* – молярна частка  $H_2O$ ; *d* – молярна частка  $CO$ ; *e* – молярна частка  $H_2$ ; *ж* – молярна частка  $CH_4$

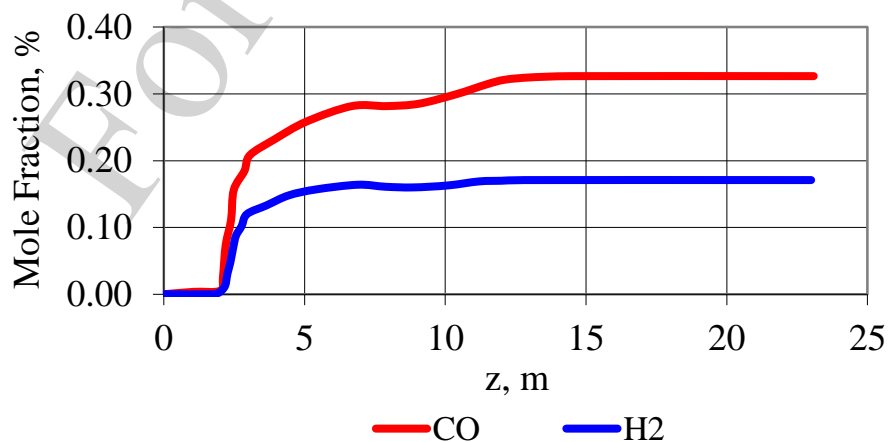


Рис. 12. Розподіл молярних часток основних горючих складових синтез-газу  $CO$  і  $H_2$  по осі барабана-охолоджувача граничних умов III роду, довжини гарячої зони барабана 11,5 м і співвідношення  $O_2/C=48,5\%$



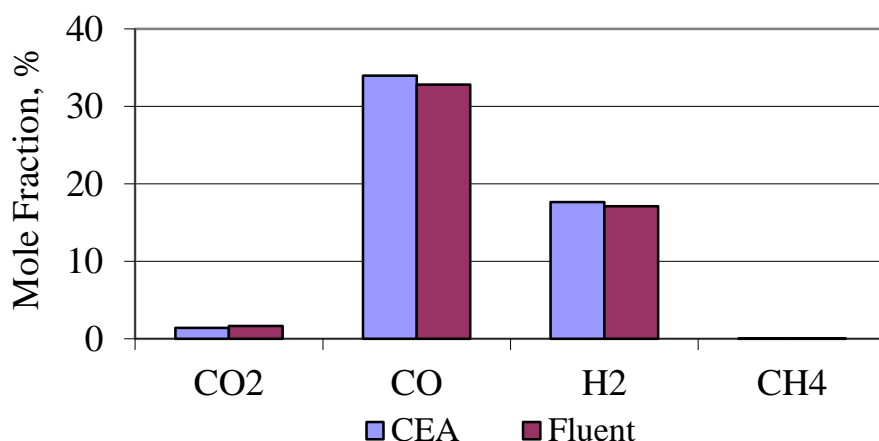


Рис. 13. Порівняння кількісного складу синтез-газу на виході з барабана-охолоджувача обертової печі за граничних умов III роду і довжини гарячої зони 11,5 м за співвідношення  $O_2/C=48,5$  %, отриманого з використанням програмних продуктів Fluent і CEA

З рис. 11, 12 також як і для ГУ I роду видно, що максимальні значення молярних часток горючих складових синтез-газу, спостерігаються в основному в зоні охолодження та у вихідній частині барабана. При цьому значення молярних часток негорючих, навпаки – мінімальні. За даними проведених розрахунків продуктивність барабана-охолоджувача за синтез-газом за співвідношенням  $O_2/C=48,5$  % за нормальних умов складає  $1485 \text{ м}^3/\text{год}$ .

Як видно з рис. 13, результати розрахунків кількісного складу синтез-газу з використанням різних програм за ГУ III роду також як і за ГУ I роду збігаються між собою.

Різниця між молярними частками CO і H<sub>2</sub> за співвідношення  $O_2/C=48,5$  % і перебуває в межах (2,8–3,4) %.

Кількісний склад синтез-газу на виході з барабана-охолоджувача отриманий за ГУ III роду близький до кількісного складу синтез-газу, отриманого за ГУ I роду. Різниця між значеннями становить: для CO – 4,1 % і для H<sub>2</sub> – 1,2 %.

Аналіз отриманих результатів показує таке:

- у разі застосування барабана-охолоджувача для генерації синтез-газу в ньому потрібно раціонально поєднати дві різні функції – камери згоряння й холодильника. З одного боку в барабані-охолоджувачі має бути зона з високою температурою для генерації синтез-газу з високим виходом горючих компонентів, а з іншого – зона охолодження для одержання на виході матеріалу із заданою температурою;

- отримані дані розрахунків підтверджують можливість застосування промислового обладнання – барабана-охолоджувача обертової печі для генерації синтез-газу за рахунок спалювання відходів виробництва – пилової фракції коксу і теплоти матеріалу, що надходить з обертової печі.

За співвідношення  $O_2/C=(42,7...51,6)$  % прогнозований кількісний склад горючих газів синтез-газу в молярних частках становить: CO=(32,8...36,9) %, H<sub>2</sub>=(17,1...18,4) % і CH<sub>4</sub>=(0,03...0,16) %;

– достовірність отриманих результатів підтверджена верифікацією даних розрахунків, виконаних з використанням програмного продукту Fluent, з даними розрахунків у наближенні рівноважної хімії за програмою CEA NASA. Різниця між молярними частками CO і H<sub>2</sub>, значення яких одержано за різних програмних продуктів, перебуває в межах (2,8...5,8) %. За даними проведених розрахунків продуктивність барабана-охолоджувача за синтез-газом за складає за нормальних умов біля 1500 м<sup>3</sup>/год теплотворною здатністю 6,1 МДж/м<sup>3</sup>;

– за відомими значеннями тиску, температури й кількісного масового складу вихідних реагентів для оперативного прогнозу кількісного складу можна користуватися програмним забезпеченням CEA NASA.

## **7. Обговорення результатів дослідження процесу генерації синтез-газу в барабані-охолоджувачі обертової печі**

Запропонована методика (1)–(6) (табл. 1, 2, рис. 1, 2) дала змогу виконати оцінку доцільності застосування барабана-охолоджувача для генерування синтез-газу як альтернативного палива для термооброблення вуглецевмісного матеріалу в обертовій печі (рис. 3–7, 9, 11, 13). Достовірність отриманих даних підтверджена верифікацією результатів розрахунків з використанням програмного продукту ANSYS Fluent [18] з даними розрахунків за програмою CEA NASA [20].

У наявній науковій літературі [1–14, 17, 22, 23] не виявлені результати як теоретичних, так і експериментальних досліджень процесу газифікації пилової фракції вуглецевмісного матеріалу в барабані-охолоджувачі обертової печі. Завдяки проведеним дослідженням з використанням розробленої числової моделі обґрунтовано можливість проведення процесу газифікації вуглецевмісного матеріалу не в спеціалізованому обладнанні, а в безпосередньо технологічному, зокрема в барабані-охолоджувачі обертової печі.

Показано, що програму CEA NASA [20], призначену для оперативних розрахунків рівноважної хімії, можна застосовувати для інженерних розрахунків матеріального складу синтез-газу промислового пічного обладнання.

Розглянута методика базується на розв'язанні вісесиметричної задачі, що обмежує практичне застосування зазначеної методики, але одночасна суттєво мінімізує вимоги до обчислювальних і часових ресурсів.

Недоліком проведених досліджень можна вважати відсутність врахування обертання барабана-охолоджувача печі, яке впливає на процес теплообміну між сипким середовищем і газом.

Подальші дослідження плануються виконати у напрямках розв'язання тривимірної задачі процесу газифікації та експериментальної перевірки отриманих теоретичних результатів.

## **8. Висновки**

1. Сформульовано математичну модель процесу газифікації частинок вуглецевмісного матеріалу в континуально-дискретній постановці, що включає тринадцять глобальних реакцій, з яких чотири – гетерогенні і дев'ять гомогенні.

2. Розроблено числову модель процесу газифікації пилової фракції вуглецевмісного матеріалу в барабані-охолоджувачі обертової печі у вісесиметрич-

ному формулюванні. Досліджено збіжність числового розв'язку задачі газифікації за кроком сітки. Встановлено, що розрахункова сітка, яка включає 73620 комірок і 75202 вузлів, призводить до похибки визначення основних параметрів моделі не більше 1–2 %.

3. З використанням розробленої числової моделі проведено оцінку доцільності процесу газифікації вуглецевмісного наповнювача в барабані-охолоджувачі обертової печі. Встановлено, що за умови співвідношення  $O_2/C=(42,7\dots51,6)$  % прогнозований кількісний склад горючих газів синтез-газу в молярних частках складає:  $CO=(32,8\dots36,9)$  %,  $H_2=(17,1\dots18,4)$  % і  $CH_4=(0,03\dots0,16)$  %.

Виконано верифікацію розробленої числової моделі. Встановлено, що різниця між молярними частками  $CO$  і  $H_2$ , значення яких одержано за різних програмних продуктів (Fluent, CEA NASA), перебуває в межах (2,8...5,8) %.

### Література

1. Liu, X. J., Zhang, W. R., Park, T. J. (2001). Modelling coal gasification in an entrained flow gasifier. *Combustion Theory and Modelling*, 5 (4), 595–608. doi: <https://doi.org/10.1088/1364-7830/5/4/305>
2. Choi, Y. C., Li, X. Y., Park, T. J., Kim, J. H., Lee, J. G. (2001). Numerical study on the coal gasification characteristics in an entrained flow coal gasifier. *Fuel*, 80 (15), 2193–2201. doi: [https://doi.org/10.1016/s0016-2361\(01\)00101-6](https://doi.org/10.1016/s0016-2361(01)00101-6)
3. 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*, 79 (4), 217–221. doi: <https://doi.org/10.1179/174602206x148865>
4. Watanabe, H., Otaka, M. (2006). Numerical simulation of coal gasification in entrained flow coal gasifier. *Fuel*, 85 (12-13), 1935–1943. doi: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2006.02.002>
5. Wu, Y., Zhang, J., Smith, P. J., Zhang, H., Reid, C., Lv, J., Yue, G. (2010). Three-Dimensional Simulation for an Entrained Flow Coal Slurry Gasifier. *Energy & Fuels*, 24 (2), 1156–1163. doi: <https://doi.org/10.1021/ef901085b>
6. Liu, H., 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*, 169, 235–245. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2016.11.040>
7. Zhang, Y., Lei, F., Xiao, Y. (2015). Computational fluid dynamics simulation and parametric study of coal gasification in a circulating fluidized bed reactor. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 10 (2), 307–317. doi: <https://doi.org/10.1002/apj.1878>
8. Zhong, W., Yu, A., Zhou, G., Xie, J., Zhang, H. (2016). CFD simulation of dense particulate reaction system: Approaches, recent advances and applications. *Chemical Engineering Science*, 140, 16–43. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2015.09.035>
9. Wu, Y., Liu, D., Ma, J., Chen, X. (2017). Three-Dimensional Eulerian–Eulerian Simulation of Coal Combustion under Air Atmosphere in a Circulating

Fluidized Bed Combustor. *Energy & Fuels*, 31 (8), 7952–7966. doi: <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.7b01084>

10. Sharma, V., Agarwal, V. K. (2019). Numerical simulation of coal gasification in a circulating fluidized bed gasifier. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 36 (3), 1289–1301. doi: <https://doi.org/10.1590/0104-6632.20190363s20180423>

11. Peng, L., Wu, Y., Wang, C., Gao, J., Lan, X. (2016). 2.5D CFD simulations of gas–solids flow in cylindrical CFB risers. *Powder Technology*, 291, 229–243. doi: <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2015.12.018>

12. 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*, 1 (1), 503–509. doi: <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2009.01.067>

13. Panov, E. N., Karvatskii, A. Y., Shilovich, T. B., Lazarev, T. B., Moroz, A. S. (2014). Mathematical Model of Solid-Fuel Gasification in a Fluidized Bed. *Chemical and Petroleum Engineering*, 50 (5-6), 312–322. doi: <https://doi.org/10.1007/s10556-014-9900-3>

14. Anetor, L., Osakue, E., Odetunde, C. (2012). Reduced Mechanism Approach of Modeling Premixed Propane-Air Mixture Using ANSYS Fluent. *Engineering Journal*, 16 (1), 67–86. doi: <https://doi.org/10.4186/ej.2012.16.1.67>

15. Gri mech 3.0 chemkin. URL: <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/files30/grimech30.dat>

16. Cantera is an open-source suite of tools for problems involving chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. URL: <https://cantera.org/>

17. Slavinskaya, N., Braun-Unkloff, M., Frank, P. (2008). Reduced Reaction Mechanisms for Methane and Syngas Combustion in Gas Turbines. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 130 (2). doi: <https://doi.org/10.1115/1.2719258>

18. ANSYS. URL: <https://www.ansys.com/>

19. MFX. URL: <https://mfix.netl.doe.gov/>

20. McBride, B. J., Gordon, S. (1996). Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications II. Users Manual and Program Description. NASA RP 1311. National Aeronautics and Space Administration.

21. Чалых, Е. Ф. (1972). Технология и оборудование электродных и электроугольных предприятий. Москва: Металлургия, 432.

22. Westbrook, C. K., Dryer, F. L. (1981). Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames. *Combustion Science and Technology*, 27 (1-2), 31–43. doi: <https://doi.org/10.1080/00102208108946970>

23. Tahir, F., Ali, H., Baloch, A. A. B., Jamil, Y. (2019). Performance Analysis of Air and Oxy-Fuel Laminar Combustion in a Porous Plate Reactor. *Energies*, 12 (9), 1706. doi: <https://doi.org/10.3390/en12091706>

24. ParaView. An open-source, multi-platform data analysis and visualization application. URL: <http://www.paraview.org/>