МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТ ПРОЦЕССА ТЕРМОКОНТАКТНОГО ПИРОЛИЗА ВЫСОКОЗОЛЬНОГО КАМЕННОГО УГЛЯ В ПИРОЛИЗЕРЕ УСТАНОВКИ С ЦКС

Пацков В. П., Крицкий А.В.

Институт угольных энерготехнологий НАН Украины, Киев

Условные обозначения:

Латинские символы: $D_j^{(x)}$ — эффективные коэффициенты продольной диффузии в слое; j — номер компонента; x — коодината длины в слое; c — концентрация, массовые доли; u — скорость конвективно — фильтрационного переноса в слое и внутри пор; W — скорость реакции и фазового перехода; m- общее число компонентов; r — координата радиуса частицы; n- общее количество реакций; T- температура; C_p — теплоемкость; F - удельная поверхность; Q — тепловой эффект реакции; C, A — доля углерода и золы в топливе; q — скорости первичного выделения влаги и летучих веществ; \overline{T}^{**} — среднемассовая температура двухфазного потока на входе в пиролизер; u — усредненная скорость истечения топлива из аппарата; P — давление; M — молекулярная масса; R — универсальная газовая постоянная.

Греческие символы: ε — пористоть; ρ — плотность; β — коэффициент конвективного массообмена между частицами и газовым потоком в свободном объеме слоя; ν — стехиометрический коэффициент; λ — коэффициент теплопроводности; $\alpha_{conv}^{(sort)}$ — коэффициент конвективного теплоообмена между газом в свободном объеме слоя и соответствующим сортом частиц; ε_{sort} — степени черноты заданного сорта частиц; σ_0 — константа Стефана — Больцмана; φ — доли облученной поверхности частиц; ε_{np} = $1/\varepsilon^c$ + $1/\varepsilon^a$ -1 — приведенная степень черноты газового потока; α — объемные доли фаз внутри частицы; ΔH — теплота фазового перехода внутри частицы.

Верхние индесы: x — продольное значение эффективной величины в слое; b- слой; g — sort - ras — заданный сорт частиц; sort = c — кокс; a — зола; — осредненное эквивалентное значение; d- сухая масса топлива; e — эквивалентное значение; p — рабочая масса топлива и равновесное значение на межфазной границе ras — конденсированная фаза; e, a — эффективное значение, зольные частицы; 0 — начальное значение; o — объем окружающей среды.

Нижние индексы: j - номер газообразного компонента; b- слой; q- гомогенные реакции; part — частица; уд — удельное значение; с — углерод; а — зола; пр — приведенное значение; w- стенки реактора; 1 — газ; 2 — твердая фаза; get- гетерогенные реакции; v.j — летучие компоненты, j- й компонент; wat — влага; фп — фазовый переход; р — равновесное значение на межфазной границе газ — конденсированная фаза; v — летучие вещества; conv — конвективное значение; кон - конденсированный компонент; 3 — конденсированная фаза; 0- начальное значение.

Ввеление.

Термохимическая переработка (пиролиз, сжигание и газификация) низкосортных, в том числе и высокозольных энергетических углей в циркулирующем кипящем слое под давлением (ЦКСД) — один из наиболее перспективных путей их эффективнного вовлечения в топливно — энергетические балансы стран СНГ, преодоления

энергетического кризиса и решения экологических проблем, связанных с уменьшением вредных выбросов в атмосферу окислов серы и азота на тепловых электростанциях [1].

В ИУЭ разрабатывается пилотная демонстрационная технологическая установка производительностью 1 тонна угля в час для двухстадийной газификации высокозольных каменных углей в ЦКС с высокой кратностью циркуляции коксозольного остатка (до 100) на воздушном дутье при давлениях до 2.5 МПа [1, 2]. Одной из ее отличительных особенностей является наличие выносного аппарата — пиролизера с медленно опускающимся плотным зернистым слоем топлива на тракте возврата коксозольного остатка после горячего циклона, предназначенного для осуществления предварительной термической подготовки топлива путем термоконтактного пиролиза (за счет нагрева частичками золы) при высокоскоростном нагреве и повышенных давлениях, а также для получения высококалорийного газа.

Процесс термического разложения твердых топлив в инертной, газификационной или окислительной среде является сложным комплексом необратимых физико химических превращений, в результате которых из исходного топлива образуются жидкие, газообразные и твердые продукты. Выход и состав образующихся продуктов зависит от условий нагревании и особенностей молекулярной структуры исследуемого топлива. Наиболее полно изучены процессы пиролиза углей при атмосферном давлении и медленном нагреве как основа технологий коксования или полукоксования углей [3]. Экспериментальных данных по кинетике и макрокинетике скоростного пиролиза известно крайне мало. Весьма ограничены экспериментальные данные по скоростному пиролизу под давлением либо при ограниченной скорости эвакуации продуктов[3 - 6], а корректные математические описания данного процесса вообще отсутствуют. Особую проблему представляют расчет скоростей фазовых переходов внутри частицы вследствие возможного образования в порах промежуточной конденсированной фазы, углеводородов, состоящей ИЗ жидких смол сконденсированных и растворенных газов [4, 7], расчет коэффициентов тепло- и массообмена между частицами и газовым потоком в свободном объеме слоя при термоконтактном пиролизе углей [7]. Отмеченные обстоятельства существенно осложняют оценку времен пребывания частиц для выхода летучих – важнейшего параметра для выбора оптимальных способов подачи угля для последующей газификации в ЦКСД [1, 2].

Физическая постановка задачи.

Рассматриваемый аппарат представляет собой цилиндрический реактор, внутри которого находится совокупность двух вазимнопроникающих континуумов: *твердой фазы*, включающей пористые сферические частицы свежего угля, коксозольного остатка и золы, подаваемые в аппарат сверху, и *газовой фазы*, содержащей продукты пиролиза топлива, фильтрующиеся через медленно опускающийся плотный зернистый слой топлива снизу. Предполагается, что продукты пиролиза рассматриваемого в настоящей работе Донецкого газового угля марки ГСШ (газопламенный семечковый штыб) состоят из легких газообразных продуктов (СО₂, СО, H₂O, H₂, CH₄, C₂H₄, N₂), паров смол и углеводородов, являющихся продуктами фазовых переходов (испарения – конденсации) и химических превращений внутри пористой структуры угольных частиц. Ввиду того, что реальный состав смол, образующихся при термической деструкции высокореакционных бурых углей, к числу которых относится и уголь ГСШ, практически неизвестен, весьма сложен и многообразен, принимается, что в рассматриваемом случае состав смол может быть описан семью ключевыми (базовыми)

компонентами, совокупность которых отражает основные структуры, входящие в молекулы угля: бензолом C_6H_6 , толуолом C_7H_8 , фенолом C_6H_5OH , фенатреном $C_{14}H_{10}$, ундеканом $C_{11}H_{24}$, диметилнафталином $C_{12}H_{12}$ и метилэтилтетралином $C_{13}H_{18}$. В газовом потоке протекают вторичные гомогенные и гетерогенные реакции отмеченных выше газообразных продуктов, паров смол и углеводородов, сопровождающиеся образованием смоляного кокса, блокирующего поры угольных частиц и затрудняющего газовыделение летучих веществ. Перенос вещества и энергии по слою осуществляется путем эффективной диффузии и теплопроводности, фильтрации, конвективного тепломассобмена между частицами топлива и золы с газовым потоком в свободном объеме слоя, радиационного теплообмена между фазами и стенками аппарата, пристеночного конвективного теплообмена.

Особенностью предлагаемой математической является учет процессов переноса внутри пористой структуры угольных частиц и прогрева инертных пористых зольных частиц. Внутри пор угольных частиц рассматриваются [7]:

- 1. Эффективная диффузия и теплопроводность.
- 2. Конвективно фильтрационный перенос в газовой и промежуточной конденсированной фазе.
- 3. Выделение влаги и летучих.
- 4. Фазовые переходы (испарение конденсации) и углеводородов.
- 5. Вторичные гетерогенные реакции газификации коксозольного остатка с CO₂, H₂O и H₂.

Стадии первичного выделения влаги и летучих внутри пор полагаются быстрыми. Принимается наличие внутри пор трех взаимодействующих фаз: <u>органо- минерального скелета</u> (коксозольного остатка, влаги, летучих и золы), <u>промежуточной конденсированной</u>, включающей упомянутые выше сконденсированные или растворенные газы, смолы и углеводороды, <u>газообразной</u>. Частицы взаимодействуют с газовым потоком в свободном объеме слоя посредством конвективного тепло— и массообмена, радиационного теплообмена.

Основными факторами, влияющими на прогрев зольных частиц, являются эффективная нестационарная теплопроводность, конвективно- фильтрационный перенос, конвективный и радиационный теплообмен с газовым потоком в свободном объеме слоя.

Принимается, что коксозольный остаток из циклона установки [1, 2] поступает в пиролизер в количествах, существенно меньших за расход свежего угля, и процессы в нем существенно не влияют на термическое разложения исходного угля. Данное предположение является, конечно, весьма приближенным и требует в дальнейшем проверки и возможного уточнения. Кроме того, процесс рассматривается в приближении неподвижного зернистого слоя.

Математическое описание процесса

Слой топлива

Перенос массы и неразрывность потоков

$$D_{j}^{(x)} \frac{\partial}{\partial x} \left[\varepsilon^{b} \rho_{1}^{b} \frac{\partial c_{j}^{b}}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[u_{1}^{b} \varepsilon^{b} \rho_{1}^{b} c_{j}^{b} \right] + \beta_{j} (\rho_{j} \Big|_{r=r_{p}} - \rho_{j}^{b}) \pm \sum_{q=1}^{n_{q}} v_{qj} W_{q}^{b} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\varepsilon^{b} \rho_{1}^{b} c_{j}^{b} \right]; (1)$$

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[u_1^b \varepsilon^b \rho_1^b \right] = \frac{\partial}{\partial t} \left[\varepsilon^b \rho_1^b \right]; j=1, \dots m_g$$
 (2)

Перенос энергии

$$\lambda_{b}^{(x)} \frac{\partial^{2} T_{1}^{b}}{\partial x^{2}} - \frac{\partial}{\partial x} \left[u_{1}^{b} \rho_{1}^{b} C \rho_{1}^{b} \varepsilon^{b} T_{1}^{b} \right] + \frac{3}{\overline{r_{c}^{(eqv)}}} \int_{r_{c}^{0}}^{0} \left[\alpha_{conv}^{(g-c)} (T_{1}^{b} - T_{p}^{(c)}) + \varepsilon_{c} \sigma_{0} \left[\left(\frac{T_{1}^{b}}{100} \right)^{4} - \left(\frac{T_{p}^{(c)}}{100} \right)^{4} \right] \right] * \\
* F_{yd}^{(b)} (1 - \varepsilon^{b}) \varphi_{c} + \frac{3}{\overline{r_{a}^{(eqv)}}} \int_{r_{a}^{0}}^{r_{a}} \left[\alpha_{conv}^{(g-a)} (T_{1}^{b} - T_{p}^{(a)}) + \varepsilon_{a} \sigma_{0} \left[\left(\frac{T_{1}^{b}}{100} \right)^{4} - \left(\frac{T_{p}^{(a)}}{100} \right)^{4} \right] \right] * \\
* F_{yd}^{(b)} (1 - \varepsilon^{b}) \varphi_{a} - \alpha_{conv}^{(g-w)} (T_{1}^{b} - T_{w}) \varepsilon_{np} F_{yd}^{(b)} - \varepsilon_{np} \sigma_{0} \varepsilon^{b} F_{yd}^{(b)} \left[\left(\frac{T_{1}^{b}}{100} \right)^{4} - \left(\frac{T_{w}}{100} \right)^{4} \right] + \sum_{q=1}^{n_{q}} W_{q}^{b} Q_{q}^{b} = \\
= \frac{\partial}{\partial t} \left[\left\{ \varepsilon^{b} \rho_{1}^{(b)} C p_{1}^{(b)} + (1 - \varepsilon^{b}) (C^{d} C p_{2}^{(c)} + A^{d} C p_{2}^{(a)}) \right\} \overline{\rho_{2}} \right] T_{1}^{b} . \tag{3}$$

Первый член в левой части уравнения (1) отражает расход массы j-го компонента в свободном объеме слоя за счет продольной эффективной диффузии, второй – конвективно-фильтрационного переноса, третий – конвективного массообмена между поверхностью угольных частиц и газовым потоком в свободном объеме слоя, четвертый – вторичных гомогенных химических превращений.

Уравнение (2) отображает изменение общего расхода массы газовой фазы в свободном объеме слоя посредством конвективно-фильтрационного переноса.

Первый член в левой части уравнения (3) соответствует изменению расхода энергии в парогазовом потоке в слое за счет эффективной теплопроводности, второй—посредством конвективно—фильтрационного переноса, третий — конвективного и лучистого теплообмена между газовым потоком и поверхностью угольных частиц, четвертый — то же, для золовых частиц; пятый — конвективного теплообмена со стенками, шестой — за счет радиационного теплообмена со стенками, седьмой — посредством тепловыделения при вторичных гомогенных химических превращениях.

Одиночные угольные частицы

Газовая фаза

Перенос массы и неразрывность потоков

$$\frac{1}{r^{2}} \frac{\partial}{\partial r} \left[D_{1j}^{(c)} \alpha_{1} \rho_{1} r^{2} \frac{\partial c_{1j}}{\partial r} \right] - \frac{1}{r^{2}} \frac{\partial}{\partial r} \left[u_{1} \alpha_{1} \rho_{1} r^{2} c_{1j} \right] \pm \sum_{get=1}^{n_{get}} v_{get,j} W_{get} + q_{v,j} + q_{wat} \pm \overline{W_{\delta i}} \tilde{n}_{1j}^{p} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial t} \left[\alpha_{1} \rho_{1} c_{1j} \right]; \quad j = \overline{1, m_{get}}$$

$$- \frac{1}{r^{2}} \frac{\partial}{\partial r} \left[\alpha_{1} \rho_{1} r^{2} \right] + \sum_{i=1}^{n_{get}} v_{get,c} W_{get} + \sum_{i=1}^{m_{j}} q_{v,j} + q_{w} + \overline{W_{\delta i}}.$$

$$(5)$$

Первый член в левой части уравнения (4) отражает изменение массы j-го компонента внутри пор угля за счет эффективной диффузии; второй — конвективнофильтрационного переноса; третий — гетерогенных внутрипористых реакций газификации кокса; четвертый — выделения летучих; пятый — влаги; шестой — фазовых переходов промежуточных конденсированных компонентов.

Уравнение (5) показывает, что общая масса газа внутри пор изменяется вследствие внутрипористых гетерогенных реакций газификации коксозольного остатка, выделения летучих, влаги и фазовых переходов.

Промежуточная конденсированная фаза Перенос массы

$$D_{3j}^{(c)} \frac{\partial}{\partial r} \left[\alpha_3 \rho_3 r^2 \frac{\partial c_{3j}}{\partial r} \right] - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[u_3 \alpha_3 \rho_3 r^2 \right] - \overline{W_{\delta i}} c_{1j}^{(p)} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\alpha_3 \rho_3 c_{3j} \right]; j = \overline{1, m_l};$$
 (6)

$$-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial t}\left[u_3\alpha_3\rho_3r^2\right] - \overline{W_{\delta i}} = \frac{\partial}{\partial t}\left[\alpha_3\rho_3\right]. \tag{7}$$

Первый член в правой части уравнения (7) отражает изменение массы j-го компонента промежуточной конденсированной фазы за счет эффективной диффузии, второй – конвективно-фильтрационного переноса, третий – фазовых переходов (испарение – конденсация).

Уравнение (7) показывает, что общий расход массы конденсированной фазы изменяется за счет фазовых переходов.

Перенос энергии

$$\frac{\lambda_{p}^{(e)}}{r^{2}} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^{2} \frac{\partial T_{p}^{(c)}}{\partial r} \right] - \frac{1}{r^{2}} \frac{\partial}{\partial r} \left[T_{p} r^{2} (u_{1} \alpha_{1} \rho_{1} c_{p_{1}} + u_{3} \alpha_{3} \rho_{3} c_{p_{3}}) \right] - \overline{W_{\delta I}} \Delta H_{\delta I} + \\
+ \sum_{get=1}^{n_{get}} W_{get} Q_{get} - q_{Wat} \Delta H_{Wat} = \frac{\partial}{\partial t} \left[c_{p}^{(e)} T_{p}^{(c)} \right], \tag{8}$$

Первый член в правой части уравнения (8) отражает изменение энергии внутри частицы за счет эффективной теплопроводности, второй — конвективно-фильтрационного переноса, третий — фазовых переходов, четвертый — тепловыделения при гетерогенных химических превращениях, пятый — испарения влаги.

Нагрев зольных частиц

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[c_p^{(e,a)} T_p^{(a)} \right] = \frac{\lambda_p^{(e,a)}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial T_p^{(a)}}{\partial r} \right] - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[u_1^{(a)} \rho_1^{(a)} r^2 c_{p1}^{(a)} T_p^{(a)} \right]. \tag{9}$$

Первый член в правой части уравнения (9) отражает перенос тепла внутри пористых зольных частиц за счет эффективной теплопроводности, второй — конвективнофильтрационного переноса.

Начальные условия

$$t = 0 : c_j^b = c_j^0; P_1^b = P_0; T_1^b = T_0; c_{3j} = 0; \alpha_3 = 0; c_{1j} = 0; P_1 = P_0; T_p^{(c)} = T_p^{(a)} = T_2^0;$$
 (10)

Граничные условия

$$x = 0: \frac{\partial c_{j}^{b}}{\partial x} = 0; P_{1}^{b} = P_{0}; \lambda_{1}^{b} \frac{\partial T_{1}^{b}}{\partial x} - u_{1}^{b} \varepsilon^{b} \rho_{1}^{b} c_{p_{1}}^{b} T_{1}^{b} = -u_{2}^{-\epsilon} c_{p_{2}}^{(c)} (1 - \varepsilon_{B}) \rho_{2} C^{p} T_{1}^{b};$$

$$(11)$$

$$x = H_{bed} : T_1^b = \overline{T}^{**}; c_i^{(b)} = c^{(\delta)};$$
(12)

$$r = 0: \frac{\partial c_{3j}}{\partial r} = \frac{\partial \alpha_3}{\partial r} = \frac{\partial c_{1j}}{\partial r} = \frac{\partial T_p^{(c)}}{\partial r} = \frac{\partial T_p^{(a)}}{\partial r} = 0;$$
(13)

$$C_{3j} = 0; \alpha_3 = 0; D_{1j}^{(e)} \alpha_1 \rho_1 \frac{\partial C_{1j}}{\partial r} - u_1 \alpha_1 \rho_1 C_{1j} + \sum_{\alpha e t = 1}^{n_{get}} v_{get.c} W_{get} = \beta_j (\rho_j^{(b)} - \rho_{1j});$$
(14)

$$\lambda_{p}^{(e)} \frac{\partial T_{p}^{(c)}}{\partial r} - u_{1}\alpha_{1}\rho_{1}c_{p1}T_{p}^{(c)} + c_{p1}\alpha_{1}\rho_{1}T_{p}^{(c)} \sum_{j=1}^{m_{g}} D_{1j}^{(e)} \frac{\partial c_{1j}}{\partial r} - u_{3}\alpha_{3}\rho_{3}c_{p3}T_{p}^{(c)} + C_{p1}\alpha_{1}\rho_{1}T_{p}^{(c)} \sum_{j=1}^{m_{g}} D_{1j}^{(e)} \frac{\partial c_{1j}}{\partial r} - u_{3}\alpha_{3}\rho_{3}c_{p3}T_{p}^{(c)} + C_{p1}\alpha_{1}\rho_{1}T_{p}^{(c)} \sum_{j=1}^{m_{g}} D_{1j}^{(e)} \frac{\partial c_{1j}}{\partial r} - u_{3}\alpha_{3}\rho_{3}c_{p3}T_{p}^{(c)} + C_{p1}\alpha_{1}\rho_{1}T_{p}^{(c)} + C_{p1}\alpha_{1}\rho_{1}T_{p$$

$$+c_{p3}\alpha_{3}\rho_{3}T_{p}^{(c)}\sum_{j=1}^{m_{l}}D_{3j}^{(e)}\frac{\partial c_{3j}}{\partial r} = \alpha_{conv}^{(g-c)}(T_{p}^{(c)} - T_{1}^{b}) + \varepsilon_{c}\sigma_{0}\left[\left(\frac{T_{p}^{(c)}}{100}\right)^{4} - \left(\frac{T_{B}}{100}\right)^{4}\right]$$
(15)

$$\lambda_p^{(e,a)} \frac{\partial T_p^{(a)}}{\partial r} - u_1^{(a)} \alpha_1^{(a)} \rho_1^{(a)} c_{p1}^{(a)} T_p^{(a)} + \alpha_1^{(a)} \rho_1^{(a)} c_{p1}^{(a)} T_p^{(a)} \sum_{j=1}^{m_g} D_{1j}^{(e,a)} \frac{\partial c_{1j}^{(a)}}{\partial r} =$$

$$= \alpha_{conv}^{(g-a)} (T_p^{(a)} - T_1^b) + \varepsilon_a \sigma_0 \left[\left(\frac{T_p^{(a)}}{100} \right)^4 - \left(\frac{T_1^b}{100} \right)^4 \right]. \tag{16}$$

Условия нормирования и уравнение состояния фаз

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1; P_1^b = RT_1^b \sum_{j=1}^{m_g} c_j / m_j; P_1 = RT_p^{(i)} \sum_{j=1}^{m_g} c_{1j} / m_j; i = c, a.$$
 (17)

Определение основных параметров модели

Эффективные коэффициенты продольного переноса в слое определяются в соответствии с рекомендациями [9].

Скорость конвективно-фильтрационного переноса в слое определяется на основе закона Дарси [10].

Коэффициент конвективного массообмена между частицами рассчитываются при помощи соотношений [11].

Скорости вторичных гомогенных реакций в газовом потоке принимаются на основе выражений [8].

Эффективная теплопроводность в слое и характеристики радиационного теплообмена в слое рассчитываются на основе рекомендаций [12].

Коэффициенты конвективного теплообмена между частицами и газовым потоком в свободном объеме определяются по выражениям [9, 11, 12], коэффициент пристеночного теплообмена – по [25].

Тепловые эффекты гомогенных и гетерогенных реакций в зависимости от температуры определяются по соотношениям [13].

Теплофизические свойства газового потока, топлива и золы определяются на основе рекомендаций [14, 15].

Коэффициент эффективной диффузии в газовой фазе определяется на основании рекомендаций [16].

Скорости конвективно-фильтрационного переноса в газовой фазе определяются на основе закона Дарси [10, 16].

Скорости внутрипористых реакций газификации коксозольного остатка топлива определяются на основании рекомендаций [17, 18].

Скорости первичного выделения летучих веществ определяются на основании G-модели [19], влаги – аналогично [20].

Для оценки полной скорости фазовых переходов смолы внутри угольных частиц разработаны два подхода. Первый из них (равновесный) состоит в наложении на рассматриваемую систему уравнений дополнительного предположения о наличии термодинамического равновесия между концентрациями компонентов в газовой и конденсированной фазе [21]. Такой подход позволяет сделать систему переопределенной и использовать некоторые из ее уравнений, например (6), для итерационной оценки полной скорости фазового перехода $\overline{W_{\Phi\Pi}}$. Концентрации компонентов в конденсированной фазе находятся при этом на основе закона Рауля-Дальтона.

Второй подход (неравновесный) [7] предполагает наличие равновесия только на межфазной границе газ — конденсированная фаза и его нарушения при удалении от нее. В этом случае промежуточные итерации для оценки $\overline{W}_{\Phi\Pi}$ не требуется и она находится аналогичным путем анализа уравнений (5) и (7) [7, 16].

Коэффициенты эффективной диффузии и плотность в конденсированной фазе определяются на основе рекомендаций [22].

Для расчета скорости конвективно-фильтрационного переноса используется уравнение закона Дарси, дополненное членом, связанным с капиллярной смачиваемостью стенок пор [7, 16].

Эффективная теплоемкость и теплопроводности угольных и зольных частиц определяются согласно [7, 16].

Теплоты фазовых переходов смолы и влаги рассчитываются согласно [22, 23].

Скорость фильтрации газа сквозь зольные частицы определяется по закону Дарси [10].

Алгоритм расчета

Для решения систем уравнений (1)-(17) разработан специальный итерационный алгоритм, аналогичный методу Зейделя с автоматическим выбором шага по времени по экстраполяции Ричардсона [3]. Его отличительными особенностями являются итерационная оценка полной скорости фазового перехода внутри пор при расчетах по равновесной модели и автоматический выбор шага по времени на основе анализа относительных погрешностей вычисления давлений, температур частиц и объемной доли конденсированной фазы внутри пор, далений и температур в парогазовом потоке на полном временном шаге и двух полушагах. При расчетах по неравновесной модели промежуточные итерации для оценки $\overline{W_{\Phi\Pi}}$ из рассмотрения исключаются.

Программа расчета

Программы расчета процесса в пиролизере в равновесных и неравновесных условиях реализованы на языке FORTRAN-90 for Windows XP [24]. Позволяют рассчитывать поля основных характеристик процессов термоконтактного пиролиза высокозольных каменных углей под давлением по высоте слоя и размерам угольных и зольных частиц в различные моменты времени. Основными исходными данными для расчетов являются внешние режимные параметры, конструктивные размеры аппарата, макрокинетические параметры стадий выделения влаги, летучих, фазовых и химических превращений, физико-химические и структурные характеристики газов и топлива.

Результаты расчетов и обсуждение

При численном анализе модели на ПЭВМ исследовано влияние режимных параметров функционирования пилотной демонстрационной установки ЦКС-1.0 [1, 2] на протекание процессов термоконтактного пиролиза донецкого газового угля марки ГСШ в равновесных и неравновесных условиях. Результаты расчетов показали, что предлагаемые математическая модель, алгоритм и программа расчета являются достаточно эффективными и устойчивыми, позволяют осуществлять численные расчеты рассматриваемого класса процессов термоконтактного пиролиза в широком диапазоне режимных условий, конструктивных размеров аппаратов, физикохимических и структурных характеристик топлива, могут быть использованы как для автономного анализа процессов в аппаратах – пиролизерах, так и при разработке методов расчета и проектирования непосредственно технологических схем с ЦКС. Примеры численных расчетов динамики изменения температур угольных частиц в слое в зависимости от давления в равновесных и неравновесных условиях представлены на рис. 1 и 2. Они показывают практическую независимость температур центра угольных частиц от давления и их близость для обоих рассмотренных моделей фазовых переходов.

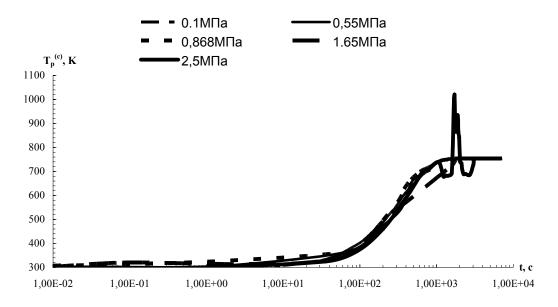


Рис. 1. Зависимость температуры центра угольных частиц ГСШ от давления в равновесном случае

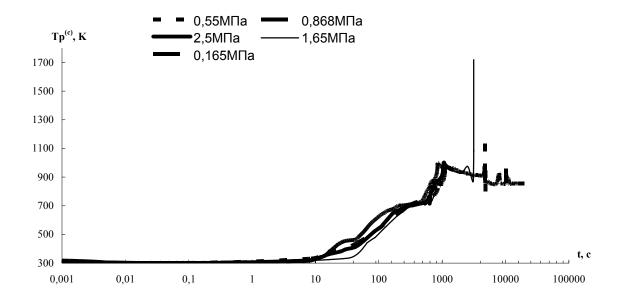


Рис. 2. Зависимость температур центра угольных частиц ГСШ от давления в неравновесном случае.

Литература

- [1] Корчевой Ю. П., Майстренко А. Ю., Топал А. И. Экологически чистые угольные энерготехнологии. Киев: Наукова думка, 2004. 188 с.
- [2] Числове моделювання нестаціонарних режимів процесу термохімічної переробки вугілля у технологічній установці з ЦКШ під тиском / Майстренко О. Ю., Пацков В. П., Топал О. І. та ін. // Металлургическая теплотехника: Сб. научных трудов. Книга первая. Дніпропетровськ: Пороги, 2005 С. 307 317.
- [3] Пацков В. П. Математическое моделирование процесса термического разложения высокозольного каменного угля под давлением в неподвижном зернистом слое // XIII межд. конференция по химическим реакторам, 18-21.06.1996 г., Новосибирск, Россия. Новосибирск: Институт катализа СО РАН, 1996. Ч. 1. С. 251 257.
- [4] Получение энергетического и бытового газа путем термоконтактного пиролиза в контуре ЦКС / Вольчин И. А., Чернявский Н. В., Тальнова Г. Н. и др.: Препринт НАНУ. Ин.-т проблем энергосбережения. Киев, 1993. 60 с.
- [5] Гапонич Л. С. Термоконтактний піроліз кам'яного та бурого вугілля у киплячому шарі. Автореф. дис.... к.-та техн. наук: 05.14.06 / Ін.-т газу НАНУ. Київ, 2000. 20 с.
- [6] Косячков О. В. Багатоступенева термопереробка твердого палива. Енерготехнологічне використання бурого вугілля. Автореф. дис.... к.-та техн. наук: 05.14.06 / Ін.-т вугільних енерготехнологій НАН та Мінпаливенерго України. Київ, 2007. 22 с.
- [7] В. П. Пацков Влияние фазовых превращений и тепломассобмена на протекание процессов пиролиза одиночных частиц высокозольных углей при повышенных давлениях // ИФЖ. -2007. Т. 80, № 2. С. 127 138.
- [8] Расчетно-теоретическое исследование процессов пиролиза и гидропиролиза угля / Калиненко Р. А, Левицкий А. А., Полак Л. С. и др. // Кинетика и катализ. 1985, Т. 26, вып. $6.-C.\ 1336-1343.$
- [9] Аэров М. А., Тодес О. М. Гидравлические и тепловые основы аппаратов со стационарным и кипящим зернистым слоем. Л.: Химия, 1968. –510 с.

- [10] Лыков А. В Тепломассообмен. Справочник. 2-е изд.-е, пер. и доп. М.: Энергия, 1978. 480 с.
- [11] Матрос Ю. Ш. Нестационарные процессы в каталитических реакторах. Новосибирск: Наука, Сибирское отделение. 1982. 258 с.
- [12] Combustion and gasification of coals in fixed bed / Hobbs M. L., Radulovich P. T., Smoot L. D. // Progress in energy and combustion science. -1993. Vol. 19, $N \ge 5. P. 505 586$.
- [13] Бесков С. Д. Технохимические расчеты. М.: Высшая школа, 1966. 520 с.
- [14] Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии / Павлов К. Ф., Романков П. Г. , Носков А. А.; Под ред . П. Г. Романкова. –3-е изд., перер. и доп.- Л.: Химия, 1981.-580 с.
- [15] Теплофизические свойства топлив и шихтовых материалов черной металлургии / Бабошин М. В. , Кричевцов Е. А., Абзамов В. М., Щелоков Я. М. М.: Металлургия, 1982.-182 с.
- [16] Кириллов В. А. Реакторы с участием газа, жидкости и твердого катализатора. Новосибирск: изд. во СО РАН, 1997. 484 с.
- [17] Пацков В. П. Математическая обработка экспериментальных данных по кинетике газификации высокозольного каменного угля с CO_2 при повышенных давлениях // Химия твердого топлива. 2004. N24. C. 66 80.
- [18] Scinner E. D., Smoot L. D. Heterogeneous reactions of char and carbon. In: Pulverised coal combustion and gasification / Ad by L. D. Smoot and N. D. Pratt. New York and London: Plennum Press, 1979. P. 149 167.
- [19] Solomon P. R., Serio M. A., Suuberg P. M. Coal pyrolysis experiment: kinetic rate and mechanisms // Progress in Energy and Combustion Science. − 1992. − Vol.18, №26. − P. 133 − 220.
- [20] Каширский В. Г., Быков В. И., Цырюльниченко Н. М. Кинетика процессов термического разложения топлива в условиях высокоскоростного нагрева // Комплексная переработка Канско-Ачинских углей: сб. научн. тр. Красноярск: изд.-во КрГУ, 1983.-C.32-35.
- [21] Пацков В. П. Численный анализ процесса термического разложения одиночных частиц высокозольного каменного угля под давлением // Тепло-массообмен ММФ 2000. HEAT/MASS TRANSFER MIF 2000. IV Минский международный форум по тепло и массообмену. Т.4. Тепло- и массообмен в химически реагирующих системах. Минск: АНК, « ИТМО им. А.В. Лыкова» НАНБ., 2000. С.57 63.
- [22] Рид Дж, Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1981. 591 с.
- [23] Справочник инженера-химика / Никольский Б. П., Григоров В. Н., Позин Б. Е. и др. М.: Химия, 1963. 593 с.
- [24] Метклаф М., Рид Дж. Описание языка программирования ФОРТРАН–90: пер. с англ. П. А. Горбунова.- М.: Мир, 1995. 304 с.
- [25] Расчеты аппаратов кипящего слоя. Справочник / Под ред. И. П. Мухленова, Б .С. Сажина, В. В. Фролова. Л.: Химия, 1986. 352 с.