

УДК 628.492:519.6

ANALYSIS OF NUMERICAL MODELING METHODS OF THE THERMAL CONVERSION OF BIOMASS OF PLANT ORIGIN

O. Osmak, O. Seriogin, S. Blazhenko
National University of Food Technologies

Key words:

plant biomass,
gas generation,
synthesis gas,
thermodynamic modeling,
heat balance,
mass balance

Article history:

Received 05.02.2025
Received in revised form
12.03.2025
Accepted 15.03.2025

Corresponding author:
ingmex@ukr.net

ABSTRACT

An analysis of printed sources on the issue of numerical modeling of the process of gasification of biomass of plant origin was conducted. Taking into account the advantages and disadvantages, the use of gasifiers of the layered type of the reverse process for the production of synthesis gas was justified.

The main approaches to numerical modeling of the process of gasification of biomass were considered, in particular the kinetic and thermodynamic equilibrium models. The bottlenecks in existing numerical models were analyzed, in particular their limitations in assumptions and limitations in covering all the necessary aspects for the accurate reproduction of real experimental data obtained on real raw materials. When studying the process of gasification of biomass, the prospects for the application of thermodynamic modeling were considered. At the same time, considerable attention was paid to the analysis of the kinetics and thermodynamics of processes, the influence of ash formation on reactions, as well as taking into account the uneven distribution of temperature and concentrations in the gasifier.

Chemical reactions in gas generators are described through vector equations that take into account the complexity of interactions between biomass, air and the resulting gases. The system of equations involves the laws of mass balance, equilibrium and heat conservation. The method of successive approximations is used to predict the gas composition and thermodynamic parameters.

In general, the work focuses on the shortcomings of existing numerical models of gas generation from biomass of plant origin, in particular, the lack of proper consideration of the influence of secondary reactions and the diversity of raw material properties. At the same time, further development of numerical modeling based on stoichiometric analysis, energy balances and improvement of the technical description of the process remains relevant and requires additional research.

DOI: 10.24263/2225-2916-2025-37-12

АНАЛІЗ МЕТОДІВ ЧИСЕЛЬНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ТЕРМІЧНОЇ КОНВЕРСІЇ БІОМАСИ РОСЛИННОГО ПОХОДЖЕННЯ

О. О. Осьмак, ORCID ID: 0000-0002-6066-6555

О. О. Серьогін, д-р техн. наук, ORCID ID: 0000-0003-0238-2922

С. І. Блаженко, канд. техн. наук, ORCID ID: 0000-0002-9152-4859

Національний університет харчових технологій

Розглянуті основні підходи до числового моделювання процесу газифікації біомаси, зокрема кінетична та модель термодинамічної рівноваги. Проаналізовані вузькі місця в існуючих числових моделях, зокрема їх обмеженість припущеннями та обмеженість в охопленні всіх необхідних аспектів для точного відтворення реальних експериментальних даних, отриманих на реальній сировині. При дослідженні процесу газогенерації біомаси розглянуто перспективи застосування термодинамічного моделювання. При цьому значну увагу приділено аналізу кінетики та термодинаміки процесів, впливу формування золи на реакції, а також врахуванню нерівномірного розподілу температури та концентрацій у газогенераторі.

Ключові слова: рослинна біомаса, газогенерація, синтез-газ, термодинамічне моделювання, тепловий баланс, масовий баланс.

Вступ. Аналіз вітчизняних і закордонних друкованих джерел показує, що однією з найбільш зручних, з точки зору практичного застосування, є технологія, яка використовує для виробництва синтез-газу енергетичні комплекси з газогенератором шарового типу оберненого процесу у своєму складі. Це пояснюється особливостями конструкції останнього та застосовуваних технологій, які поєднують у собі можливості регулювання одиничної потужності, хороші екологічні показники, а також якість одержуваного генераторного газу.

Огляд останніх досліджень і публікацій. У результаті літературного пошуку виявлено два основні підходи до моделювання процесу газифікації біомаси рослинного походження в газогенераторах шарового типу оберненого процесу — кінетична модель, яку рекомендується використовувати при температурах нижче 750 °С, і модель термодинамічної рівноваги.

Під час аналізу створених на сьогодні чисельних моделей процесу газифікації рослинної біомаси особливу увагу привертають ті, в основі яких покладено саме термодинамічний аналіз, що базується на можливості однозначного визначення складу і термодинамічних властивостей системи при заданих параметрах температури і тиску. Він надає можливість одночасно визначити практично весь набір технічних характеристик, за винятком летких.

Мета досліджень: проаналізувати існуючі числові моделі процесу газогенерації біомаси рослинного походження, а також підтвердити їх адекватність, порівнюючи з відомими експериментальними даними.

Матеріали і методи. Зважаючи на різноманіття біомаси рослинного походження, не існує стандартної методики знаходження цих характеристик, тому актуальним залишається питання розробки такої методики. Одним із методів чисельного опису процесів, що відбуваються в газогенераторі під час газифікації біомаси рослинного походження, є термодинамічне моделювання, в результаті якого визначають:

- 1) рівноважний склад синтез-газу;
- 2) відносні кількості окислювача й тепла, які необхідні для процесу газифікації;

3) оптимальні значення калорійності синтез-газу та ефективності процесу.

Результати досліджень. Схематично рівноважну термодинамічну систему відображено на рис. 1.

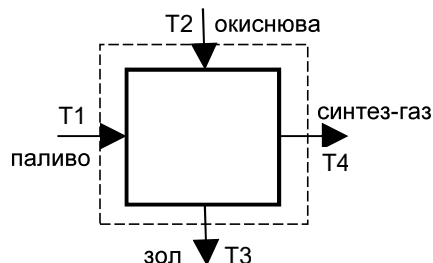


Рис. 1. Схеми рівноважної термодинамічної системи

Вихідна система складається з таких рівнянь [1]:

1. Закон Дальтона, що зв'язує парціальний тиск рівноважних фракцій з повним тиском системи:

$$\sum_{i=1}^M p_i = p_0, \quad (1)$$

де M — загальна кількість компонент у газі; p_0 — повний тиск; p_i — тиск i -го компонента.

2. Рівняння збереження маси:

$$\frac{\sum_{i=1}^M v_{j,i} p_i}{\sum_{i=1}^M v_{N,i} p_i} = B_j, \quad (2)$$

де $v_{j,i}$ — стехіометричний коефіцієнт, що визначає зміст j -го елемента в i -й компоненті; N — загальне число хімічних елементів у системі; B_j — відношення вмісту j -го елемента до N елементів у вихідній газовій суміші.

3. $(M - 1) - (N - 1) = M - N$ рівняння рівноваги складних речовин:

$$p_i = \frac{K_i}{\prod_{j=1}^N p_j} \cdot v_{j,i}, \quad (3)$$

де K_i — константа рівноваги реакції дисоціації на атоми; p_i — парціальні тиски складних речовин; p_j — парціальні тиски атомарних складових.

4. l рівнянь рівноваги між конденсованою та газовою фазами:

$$p_l = p_{sl}, \quad (4)$$

де l — кількість компонент у конденсованій фазі; p_{sl} — тиск насиченої пари компоненти, що конденсуються.

При цьому припускається, що кожна компонента знаходиться в рівновазі тільки з газовою фазою і таким чином конденсація компонент відбувається роздільно.

Система рівнянь вирішується методом послідовних наближень. У працях [1—3] представлені результати чисельного термодинамічного визначення швидкого окислення вуглецю, що міститься у вхідній сировині, в ході процесу термічного розкладання біомаси. Проте необхідно зазначити, що в згаданих дослідженнях усі газоподібні речовини приймалися ідеальними газами. Передбачалося, що при відносно невисоких значеннях тиску (до 0,3 МПа) відхилення властивостей утворених газів від ідеальних будуть незначні і цими розбіжностями можна знехтувати.

У працях [1—3] зазначено, що тиск у газогенераторах шарового типу зворотного процесу практично однаковий по всьому об'єму шахти, однак температура і концентрації окремих складових істотно відрізняються по перетину газогенератора. Досягнення рівноважного стану визначається особливостями нерівномірного розподілу

температури в шахті газогенератора і швидкістю проходження через неї газової суміші. Варто зауважити, чим вища температура зони і менша швидкість проходження через цю зону продуктів реакцій газоутворення, тим більша швидкість встановлення рівноваги. Також до недоліків, проаналізованих методів варто віднести той факт, що вони не враховують теплові ефекти реакцій. Таким чином, термодинамічний аналіз дає змогу зробити висновки лише про загальні закономірності зміни рівноважного стану системи залежно від її вихідних параметрів.

Безумовно, з погляду практичного застосування технології отримання синтез-газу шляхом термохімічної конверсії біомаси рослинного походження в газогенераторах шарового типу оберненого процесу особливо цікавим є визначення діапазону стабільної роботи газогенератора. В працях [4, 5] процес газифікації досліджується з точки зору стехіометричного аналізу, а також з урахуванням масового і теплового балансів. При цьому приймаються ряд припущень: система одномірна; поперечний переріз вихідного палива постійний; утворений синтез-газ підпорядковується законам ідеального газу; потік газу через шар палива може бути описаний за допомогою закону Дарсі; швидкість переміщення палива постійна; пористість і проникність змінюється в часі і в процесі переміщення палива по шахті газогенератора; розглядається тільки конвективна складова теплообміну; процес окислення відбувається лише на поверхні частинок.

З умови збереження маси для i -ої компоненти газової суміші отримаємо [6]:

$$\frac{\partial \rho_{gi}}{\partial \tau} + \frac{\partial (\rho_{gi} w_{gi})}{\partial x} = I_i + S_{gi}, \quad (5)$$

де ρ_{gi} — густина i -ї компоненти газової суміші, кг/м³; w_{gi} — швидкість i -ї компоненти газової суміші, м/с; I_i — інтенсивність масообміну i -ї компоненти, кг/(с м³); S_{gi} — питома масова витрата i -ї компоненти газової суміші, кг/(м³ с); τ — час, с.

З умови збереження маси для i -ї компоненти палива отримаємо:

$$\frac{\partial \rho_{pi}}{\partial \tau} + w_p \frac{\partial (\rho_{pi})}{\partial x} = -I_i + S_{pi}, \quad (6)$$

де ρ_{pi} — щільність i -ї компоненти палива, кг/м³; w_p — швидкість переміщення палива, м/с; S_{pi} — питома масова витрата i -ї компоненти палива, кг/(м³ с).

Баланс енергії для газової суміші матиме вигляд:

$$\frac{\partial Q_{gi}^r}{\partial \tau} + \frac{\partial (Q_{gi}^r w_{gi})}{\partial x} = E_g + \sum_i (I_i h_{zgi} + S_{vxi} h_{vxi}), \quad (7)$$

де Q_{gi}^r — нижча теплота згорання газу, Дж/м³; w_{gi} — швидкість газу, м/с; E_g — питома теплотворність газу, Вт/м³; S_{vxi} — питома масова витрата i -ї компоненти на вході в зону газоутворення, кг/(м³ с); h_{vxi} — ентальпія i -ї компоненти на вході в зону газоутворення, Дж/кг.

Баланс енергії для палива:

$$\frac{\partial Q_{pi}^r}{\partial \tau} + w_p \frac{\partial (Q_{pi}^r)}{\partial x} = E_p - \sum_i I_i h_{zgi} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_p^p \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (8)$$

де Q_{pi}^r — нижча теплота згорання палива, Дж/м³; w_p — швидкість руху палива, м/с; E_p — питома теплотворність палива, Вт/м³; I_i — інтенсивність масообміну i -ї компоненти, кг/(с м³); h_{zgi} — ентальпія i -ї компоненти в зоні газоутворення, Дж/кг; λ_p^p — коефіцієнт радіаційної теплопровідності палива, (Вт/м К); T_p — температура палива, К.

Швидкість газової суміші (за законом Дарсі):

$$w_g = w_p - \frac{K}{\mu_g} \left(\frac{dp}{dx} + g \cos \vartheta \rho_g \right), \quad (9)$$

де K — проникність палива, m^2 ; μ_r — динамічна в'язкість газу, $кг/(м \cdot с)$; p — тиск газу, Па; ϑ — кут між напрямком руху і вертикаллю, градус; ρ_r — густина газу, $кг/м^3$; w_{Π} — швидкість руху палива, $м/с$ ($w_{\Pi} = const$).

Закон Менделєєва-Клапейрона для ідеального газу:

$$p = \frac{RT_r \rho_r}{M_r}, \quad (10)$$

де R — універсальна газова постійна, $R = 8314$ Дж/(кг К); T_r — температура газу, К; ρ_r — щільність газу, $кг/м^3$; M_r — молекулярна маса газу, кг.

Кожен компонент газової суміші має свою молекулярну масу, що в сукупності утворюють газову суміш. Тоді з умови збереження маси газової суміші отримаємо:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(n_r w_r + \sum_i \frac{m_{ri} \Delta w_{ri}}{M_i} \right) = \sum_i \frac{l_i + S_{ri}}{M_i}, \quad (11)$$

де n_r — кількість компонент газової суміші; Δw_{ri} — зміна швидкості i -ї компоненти газу, $м/с$; M_i — молекулярна маса i -ї компоненти, кг.

Кількість компонент газової суміші визначаємо за формулою:

$$n_r = \sum_i \frac{\rho_{ri}}{M_i} = \Pi \rho_r \sum_i \frac{C_{ri}}{M_i} = \frac{\Pi \rho_r}{M_i}, \quad (12)$$

де Π — пористість сировини, біомаси рослинного походження; C_{ri} — масова частка i -ї газової частинки.

З урахуванням всіх перетворень рівняння Дарсі набуде вигляду:

$$\frac{dp}{dx} = - \left(\frac{\mu_r (w_r - w_{\Pi})}{K} \right) - g \cos \vartheta \rho_r. \quad (13)$$

Формула (13) використовується для розрахунку розподілу тиску на початковій стадії утворення синтез-газу.

Густина газу та вхідної сировини визначається як сума густин компонент газової фази і палива відповідно:

$$\rho_r = \sum_i \rho_{ri}, \quad \rho_{\Pi} = \sum_i \rho_{\Pi i}. \quad (14)$$

Маса газу та палива:

$$m_r = \frac{\rho_r}{\Pi}, \quad m_{\Pi} = \frac{\rho_{\Pi}}{1 - \Pi}. \quad (15)$$

Швидкість газу визначається як середньозважена швидкість:

$$w_r = \frac{\sum_i \rho_{ri} w_{ri}}{\rho_r}, \quad (16)$$

де w_{ri} — швидкість i -ї компоненти газової суміші визначається за формулою:

$$w_{ri} = w_r + \Delta w_{ri}, \quad (17)$$

в якій $\Delta w_{ri} = - \frac{D_i}{\Pi C_{ri}} \frac{dC_{ri}}{dx}$ — зміна швидкості i -ї компоненти газової суміші, $м/с$; D_i — коефіцієнт дифузії i -ї компоненти, $м^2/с$.

Молекулярна маса газу:

$$M_r = \frac{M_i}{\sum_i C_{ri}}. \quad (18)$$

Ентальпія газу і палива:

$$h_r = \frac{Q_{ri}^r}{m_r}, \quad (19)$$

де Q_{ri}^r — нижча теплота згоряння газу, Дж/м³;

$$h_{\Pi} = \frac{Q_{\Pi i}^r}{m_{\Pi}}, \quad (20)$$

де $Q_{\Pi i}^r$ — нижча теплота згоряння палива, Дж/кг.

Ентальпія палива для i -ї компоненти в зоні газоутворення:

$$h_{\text{зri}}^{\Pi} = c_{\Pi i} (T_{\Pi} - T_{0\Pi}) + \Delta h_{\text{зri}}, \quad (21)$$

де c_{pi} — теплоємність i -ї компоненти палива, Дж/(кг К); $T_{0п}$ — початкова температура палива, К; T_p — температура палива, К; $\Delta h_{згі}$ — приріст ентальпії i -ї компоненти палива в зоні газоутворення, Дж/кг.

Ентальпія, що утворюється в результаті летких компонентів синтез-газу при взаємодії з i -ю компонентою:

$$h_{згі}^r = c_{gi}(T_g - T_{0г}) + \Delta h_{згі}, \quad (22)$$

де c_{gi} — теплоємність i -ї компоненти газу, Дж/(кг К); $T_{0г}$ — початкова температура газу, К; T_g — температура газу, К; $\Delta h_{згі}$ — ентальпія піролізу i -ї компоненти в зоні газоутворення, Дж/кг.

Коефіцієнт теплопередачі від палива до газу визначається таким співвідношенням:

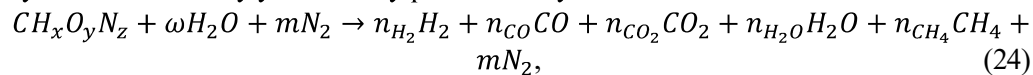
$$k_{п-г} = k_{0п-г} + c_1 Re_g^{c_2} Pr_g^{c_3}, \quad (23)$$

де Re_g — число Рейнольдса для газу; Pr_g — число Прандтля для газу; $k_{0п-г}$ — коефіцієнт теплопередачі від палива до газу при $w_g = w_p \omega_g = \omega_r$, Вт/(м² с); c_1, c_2, c_3 — емпіричні константи для кожного виду палива.

Аналіз літературних джерел надає можливість зробити висновок, що існуючі тепер чисельні моделі процесу утворення синтез-газу з біомаси рослинного походження далекі від досконалості. Вони не дають змоги повною мірою підтвердити збіг розрахункових та експериментальних даних у всьому діапазоні режимних параметрів. Так, для прикладу, модель, представлена в [7], дає хорошу збіжність чисельного моделювання та експериментального дослідження при низьких швидкостях нагріву ($\sim 2,219 \cdot 10^{-4}$ Дж м²/с), але не враховує вплив вторинних реакцій під час газоутворення.

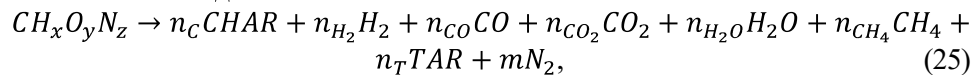
Для визначення летючих, як правило, застосовують два методи [5]. Згідно з першим методом, використовуються дослідні дані, типові для цього випадку, які проте не враховують специфічних особливостей, властивих тій чи іншій сировині [8, 9]. За другим методом необхідно мати елементний склад і результати лабораторних досліджень щодо виходу летючих для конкретно використовуваного палива [5].

Для опису процесу термоконверсії біомаси рослинного походження використовують одностадійну узагальнену реакцію виду:



де x, y, z — кількість атомів водню, кисню та азоту, приведена до одного атома вуглецю; ω — кількість вологи, приведена до 1 моля органічної маси палива, кг/моль; m — кількість азоту.

У разі процесу піролізу можна записати подібну одностадійну узагальнену реакцію, яка матиме вигляд:



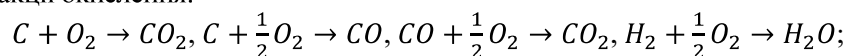
де $CHAR$ — кокс; TAR — смола.

При цьому їхній бруто-склад може бути виражений формулою — $C H_{x_1} O_{y_1} N_{z_1}$ і $C H_{x_2} O_{y_2} N_{z_2}$ відповідно.

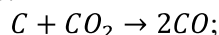
Запис подібних рівнянь є першим кроком при термодинамічному моделюванні, з них можна припустити основні реакції, які відбуваються при термохімічній конверсії біомаси рослинного походження.

Таким чином, механізм термоконверсії записують у вигляді декількох бруто-реакцій, в яких паливо та кокс представлені вуглецем і мають такий вигляд [10]:

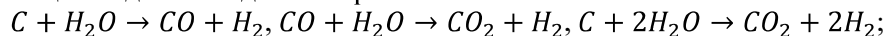
- реакції окислення:



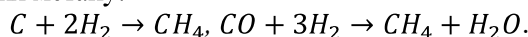
- реакція монооксиду вуглецю:



- реакції з водою та водяною парою:



- реакції утворення метану:



Наведені реакції відбуваються як із поглинанням, так і з виділенням тепла.

Хімічні реакції в газогенераторі можуть бути записані у векторній формі (вектор сьомого порядку з координатами, розташованими в такій послідовності: $C, O_2, H_2O, CO, CO_2, H_2, CH_4$):

$$\bar{r}_1 = \left(-1, -\frac{1}{2}, 0, 1, 0, 0, 0\right), \bar{r}_2 = (-1, -1, 0, 0, 1, 0, 0), \bar{r}_3 = (-1, 0, -1, 1, 0, 1, 0);$$

$$\bar{r}_4 = (-1, 0, 0, 2, -1, 0, 0), \bar{r}_5 = (-1, 0, 0, 0, 0, -2, -1), \bar{r}_6 = \left(0, -\frac{1}{2}, 1, 0, 0, -1, 0\right);$$

$$\bar{r}_7 = \left(0, -\frac{1}{2}, 0, -1, 1, 0, 0\right), \bar{r}_8 = (0, 0, -1, -1, 1, 1, 0), \bar{r}_9 = (0, 0, 1, -1, 0, -3, 1);$$

$$\bar{r}_{10} = (-1, 0, -2, 0, 1, 2, 0), \bar{r}_{11} = (-3, 0, -2, 2, 0, 0, 1), \bar{r}_{12} = (-2, 0, -2, 0, 1, 0, 1).$$

До газогенератора надходять: біомаса (паливо), повітря (кисень, водяна пара). На виході — синтез-газ, у якому присутні CO, CO_2, H_2, CH_4 . У векторній формі загальна реакція може бути записана у вигляді $(-, -, -, +, +, +)$. Такий вигляд мають вектори $\bar{r}_1, \bar{r}_2, \bar{r}_3, \bar{r}_{10}, \bar{r}_{11}, \bar{r}_{12}$. Усі інші реакції можуть бути отримані шляхом лінійних комбінацій з базисних реакцій: $\sum \alpha_i \cdot r_i$ де $0 < \alpha < 1$. Багатокутник $\bar{r}_1 - \bar{r}_2 - \bar{r}_3 - \bar{r}_{10} - \bar{r}_{11} - \bar{r}_{12}$ містить усі можливі комбінації по вихідному продукту.

Відхилення від лінії теплового балансу в ліву сторону свідчить про наявність теплових втрат, високу температуру синтез-газу на виході з газогенератора, наявності реакції утворення метану. Відхилення в праву сторону може слугувати маркером наявності зовнішнього джерела тепла. Ступінь цього відхилення можна використовувати при оцінці конкретного технічного процесу.

Для визначення зони сухої перегонки необхідно враховувати кінетику виходу летких речовин. Процес найкраще описується рівнянням першого порядку або системою з n подібних рівнянь, де, як правило, $n = 2$. Це неодноразово підтверджувалось у ході проведення фізичних експериментів [11].

$$df = K_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT}} \cdot f dt, \quad (26)$$

де f — частка летючих, що залишаються у частинці палива; E — енергія активації; K_0 — константа швидкості реакції.

У [12] запропонована формула залежності виходу летючих від температури:

$$\log f = b_0 + b \cdot \log T + c \cdot V, \quad (27)$$

де b_0, b, c — константи, T — температура, °C; V — відсотковий вміст летючих у вхідному паливі (на горючу масу).

Ряд авторів [13, 17] вважають, що термічний розпад молекули речовини складається з великого числа незалежних реакцій, до кожної з яких застосовано рівняння першого порядку. При цьому стверджується, що величину енергії активації можна виразити у вигляді безперервної функції розподілу $F(E)$. Тоді $F(E)dE$ дає вагову частку летючих, що вийшли з частинки за нескінченно великий проміжок часу, при цьому значення енергії активації знаходиться в межах між E і $E + dE$. Як правило, як функцію розподілу використовують функцію Гауса:

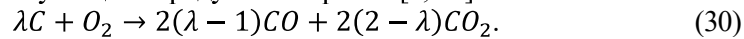
$$F(E) = \frac{e^{\left[\frac{-(E-E_0)^2}{2\sigma^2}\right]}}{\sqrt{2\pi}\cdot\sigma}, \quad (28)$$

де σ — середньоквадратичне відхилення.

Тоді

$$\frac{f}{V_1} = \int_0^\infty e^{\left[-\int_0^t k_0 \cdot e^{\left(-\frac{E}{RT}\right)} dT\right]} \cdot F(E) dE, \quad (29)$$

де константи k_0 , E_0 , σ , V_1 визначаються на основі дослідних даних. Переваги такого підходу полягають в усуненні залежності від температури, що дає змогу домогтися кореляції між експериментальними даними по конкретному виду палива для різних умов експерименту і одними й тими ж значеннями констант K_0 , E_0 , σ , V_1 . Реакції окислення нерідко об'єднують в одну, вводячи коефіцієнт λ , який характеризує первинний розподіл окислів вуглецю в продуктах згоряння [5, 14]:



У всіх моделях швидкість руху твердої фази приймається постійною і визначається швидкістю відведення золи через колосникові ґрати. При цьому нехтують аксіальним та радіальним тепло- і масопереносом. Також передбачається, що тиск зберігається незмінним у всьому обсязі газогенератора. У [5] реактор розглядається у вигляді циліндра, що складається з внутрішнього адіабатичного ядра, для якого справедливі зазначені вище припущення, і зовнішньої області товщиною $l = \sqrt{\frac{K_l \tau}{\rho \cdot c_p}}$, що враховує теплові втрати в навколишнє середовище. Тут K_l — коефіцієнт радіальної теплопровідності прикордонного шару; τ — час перебування частинки в реакторі; $\rho \cdot c_p$ — добуток густини вуглецевмісного палива на його теплоємність.

З урахуванням викладених вище припущень рівняння масового балансу можна представити у вигляді:

$$\text{- для вуглецю:} \quad \frac{\partial C_C}{\partial t} = \frac{\partial F_C}{\partial z} + (r_3 + r_4 + r_5 + r_6); \quad (31)$$

$$\text{- для пари:} \quad \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial t} = -\frac{\partial F_{H_2O}}{\partial z} - (1 - \beta) \cdot r_3 + \beta \cdot (r_4 + r_5) + \frac{\alpha}{2} \cdot r_6 - r_8; \quad (32)$$

- для водню:

$$\frac{\partial C_{H_2}}{\partial t} = -\frac{\partial F_{H_2}}{\partial z} + \left(1 - \beta + \frac{\alpha}{2}\right) \cdot r_3 + \left(\frac{\alpha}{2} - \beta\right) \cdot r_4 - \left(\frac{4 - \alpha - 2\beta}{2}\right) \cdot r_5 + r_8; \quad (33)$$

$$\text{- для CO:} \quad \frac{\partial C_{CO}}{\partial t} = -\frac{\partial F_{CO}}{\partial z} + r_3 + 2 \cdot r_4 + \left(2 - 2 \cdot \gamma - \beta + \frac{\alpha}{2}\right) \cdot r_6 - r_8; \quad (34)$$

$$\text{- для CO}_2\text{:} \quad \frac{\partial C_{CO_2}}{\partial t} = -\frac{\partial F_{CO_2}}{\partial z} + \left(2 \cdot \gamma + \beta - \frac{\alpha}{2} - 1\right) \cdot r_6 - r_4 + r_8; \quad (35)$$

$$\text{- для CH}_4\text{:} \quad \frac{\partial C_{CH_4}}{\partial t} = -\frac{\partial F_{CH_4}}{\partial z} + r_5; \quad (36)$$

$$\text{- для O}_2\text{:} \quad \frac{\partial C_{O_2}}{\partial t} = -\frac{\partial F_{O_2}}{\partial z} - \gamma \cdot r_6; \quad (37)$$

- для газоподібної фази:

$$\frac{\partial C_r}{\partial t} = -\frac{\partial F_r}{\partial z} + \left(\frac{\alpha}{2} + 1\right) \cdot r_3 + \left(\frac{\alpha}{2} + 1\right) \cdot r_4 + \left(\frac{\alpha}{2} - 1\right) \cdot r_5 + \left(\frac{\alpha}{2} + 1 - \gamma\right) \cdot r_6, \quad (38)$$

де F_i — молярний потік i -ї компоненти; z — координата по висоті газогенератора; r_i — швидкість реакції i -ї компоненти; V — швидкість твердої фази.

Передбачається, що реагенти входять у контакт з твердою фазою при температурі газу, а залишають поверхню частинок при температурі, яку має тверда фаза.

Енергетичний обмін між твердою і газоподібною фазами можна врахувати за допомогою коефіцієнта тепловіддачі — h , який враховує всі види теплообміну. Експериментальні дані щодо h в зоні активного газоутворення практично відсутні [12], тому для визначення коефіцієнта тепловіддачі використовуються співвідношення, отримані для h у за відсутності хімічної рівноваги [15]. У праці [9] запропоновано використовувати коефіцієнт пропорційності ξ . Тобто коефіцієнт тепловіддачі $h_1 = \xi \cdot h$, при цьому коефіцієнт пропорційності ξ визначають шляхом порівняння результатів чисельного моделювання та експериментальних даних.

Рівняння енергетичного балансу матиме вигляд [16]:

- для твердої фази (вуглець):

$$-\frac{\partial}{\partial t}(C_s \cdot H_s) + \frac{\partial}{\partial z}(F_s \cdot H_s) = \sum_{i=3}^7 r_i \cdot \Delta H_i(T_s) + \sum_{i=3}^7 r_i \cdot \sum_{j=1}^N [b_{ij} \cdot H_j(T_s) - a_{ij} \cdot H_j(T_g)] + \xi \cdot h \cdot S_l \cdot (T_s - T_g); \quad (39)$$

- для газоподібної фази:

$$-\frac{\partial}{\partial t}[\sum_{j=1}^N C_{gj} \cdot N_j(H_g)] + \frac{\partial}{\partial z}[\sum_{j=3}^N F_j \cdot H_j(T_g)] = \sum_{i=1}^7 r_i \cdot \sum_{j=3}^N [b_{ij} \cdot H_j(T_s) - a_{ij} \cdot H_j(T_g)] - V \cdot S_w \cdot (T_g - T_w) - \xi \cdot h \cdot S_l \cdot (T_s - T_g) - r_8 \cdot \Delta H_8, \quad (40)$$

де F_j — потік i -ї компоненти; $H_j(T)$ — ентальпія компоненти при температурі T ; $\Delta H_i(T)$ — теплові ефекти реакцій при температурі T ; H_g — ентальпія газового потоку; H_s — ентальпія твердої фази; F_s — витрата твердої фази; a_{ij} , b_{ij} — стехіометричні коефіцієнти реагенту (i) і продукту реакції цього реагенту в реакції j відповідно; S_l — площа поверхні твердої фази в одиниці об'єму; S_w — площа поверхні стінки шахти газогенератора в одиниці об'єму; N — кількість компонент у газовій фазі; T_s , T_w , T_g — температури твердої фази, стінки і газового потоку відповідно; V — коефіцієнт тепловіддачі газ-стінка; C_s , C_g — концентрації твердої і газоподібної фаз відповідно; r_i — швидкість реакції i -ї частинки.

Граничні умови:

$$\begin{aligned} z = L &\Rightarrow F_C = F_C^0, T_s = T_{sf} \\ z = 0 &\Rightarrow F_{H_2O} = F_{H_2O}^0, F_{O_2} = F_{O_2}^0, F_{CO} = F_{H_2} = F_{CO_2} = F_{CH_4} = 0, \\ &T_g = T_{gf}, \end{aligned}$$

де $F_{H_2O}^0$, $F_{O_2}^0$, F_C^0 — потоки пару, кисню і вуглецю на вході в шахту газогенератора; L — висота шахти газогенератора; T_{gf} і T_{sf} — значення температури дуття і твердого палива на вході в газогенератор.

Початкові умови: при $t = 0$ задаються вихідні профілі температури і концентрації (можуть бути взяті з рішення стаціонарної задачі).

За незначних температур у зоні газоутворення рівновага зворотних реакцій зміщується в бік вхідних речовин. Зміни у складі генераторного газу можна врахувати, вводячи в розгляд константи швидкостей зворотних реакцій [14]. Тоді в рівняннях

масового та енергетичного балансів з'являються додаткові складові, аналогічні за формою величинам, що враховують перебіг прямих реакцій.

Вираз для визначення константи швидкостей у загальному вигляді матиме вигляд [14]:

$$\bar{K} = \frac{1}{\frac{1}{K \cdot (1 + \varepsilon \cdot S_i)} + \frac{\zeta}{D \cdot Nu_d}}, \quad (41)$$

де S_i — реакційна поверхня отворів в одиниці об'єму частинки; ε — активна глибина проникнення реакції; ζ — розмір частки; D — коефіцієнт молекулярної дифузії у вільній газовому середовищі; $Nu_d = \frac{\beta \cdot \zeta}{D}$ — дифузійний критерій Нусельта (β — коефіцієнт масообміну).

Константа швидкості кінетики хімічних реакцій газифікації може бути визначена за формулою Арреніуса:

$$K = K_0 \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T}}. \quad (42)$$

Розрахувати дифузійний опір у газовому середовищі можна за емпіричними формулами для визначення Nu_d , рекомендованим у [15]:

$$Nu_d = A \cdot Re_{\Pi}^r \cdot S_l^v, \quad (43)$$

де $Re_{\Pi}^r = \frac{\rho \cdot V_{\Pi}}{\mu}$, v — кінематична в'язкість газового середовища; V_{Π} — середня швидкість потоку між частинками; S_l — реакційна поверхня частинок в одиниці об'єму; A — емпірична константа.

Допускаючи подібність полів температури і концентрації, використовуємо ті ж залежності для визначення коефіцієнта тепловіддачі [15]:

$$Nu_{\Pi} = \frac{\beta \cdot \zeta}{\lambda_r},$$

де λ_r — теплопровідність газової фази.

У цьому випадку замість критерію S_l до виразу входить критерій Прандтля:

$$Pr = \frac{v}{a},$$

де a — коефіцієнт температуропровідності.

Щоб врахувати вплив золи на процес газифікації біомаси рослинного походження, використовують дві моделі [5]:

- модель, що враховує зростання оболонки ядра частинки;
- модель відокремленої золи.

Перша модель передбачає наявність частинок однакового розміру і згідно з цією моделлю в міру перебігу реакції газоутворення по нормалі до поверхні утворюється шар золи. Газоподібні реагенти змушені дифундувати через зольний шар для того, щоб вступити в реакцію з ядром частинки. Цей додатковий опір враховується аналогічно опору дифузії речовини через газову оболонку до зовнішньої поверхні частинки.

Друга модель передбачає, що шар золи не утворюється на поверхні частинки, натомість зола накопичується в просторі між частинками, що призводить до збільшення об'єму порожнин між частинками і, отже, до зменшення реакційної поверхні в одиниці об'єму. Значення швидкості реакції в цьому випадку треба помножити на V_l — частину об'єму, який займають частинки біомаси, що не вступили в реакцію.

Висновки. При огляді елементів числових моделей процесу газифікації біомаси рослинного походження в газогенераторах шарового типу проаналізовано досвід

створення вказаного обладнання за кордоном і порівняно дані чисельних та експериментальних досліджень, а також враховані проблеми, що виникали в процесі цього дослідження.

Наведений вище аналіз сучасних чисельних модельних уявлень кінетики хімічних реакцій, масо- і теплообміну в реакційному обсязі, а також деякі кількісні оцінки на його основі дає чітке розуміння, що подібні підходи поки придатні для постановки теплофізичного експерименту з визначення граничних умов, а не для теплотехнічних визначень розподілених моделей реактора. Тому в подальших дослідженнях варто зосередитись на можливостях застосування імітаційного моделювання, в основу якого прийняти балансовий метод визначення ключових параметрів, заснований на осереднених характеристиках процесу газифікації біомаси рослинного походження, отриманих на реальних об'єктах, реальному паливі і в реальних масштабах сконструйованих газогенераторів.

ЛІТЕРАТУРА

1. Assad, M. S., Penyazkov, O. G., & Skoblya, S. G. (2011). Calculation of the equilibrium composition of multicomponent thermodynamic systems by the method of entropy maximization. *J. Eng. Phys. Thermophy*, 84, 13—22. <https://doi.org/10.1007/s10891-011-0451-6>.
2. McAllister, S., Chen, J. Y., Fernandez-Pello, A. C. (2011). *Thermodynamics of Combustion. In: Fundamentals of Combustion Processes*. Mechanical Engineering Series. Springer, New York, NY. https://doi.org/10.1007/978-1-4419-7943-8_2.
3. Safarian, S., Rydén, M., Janssen, M. (2022). Development and Comparison of Thermodynamic Equilibrium and Kinetic Approaches for Biomass Pyrolysis Modeling. *Energies*, 15, 3999. <https://doi.org/10.3390/en15113999>.
4. Wei, James. (1979). Stecheometric analysis of coal gasification. *Ind. and Enng. Chem. Process. Des. and Develop.*, 18(3), 554—558.
5. Yoon, H., James, Wei, Norton, M. Denn. (1978). A model for moving-bed coal gasification reactors. *AJChC Journal*, 24(5), 885—904.
6. Niels, Bech, Larsv, Wolff. (1994). *Modelling of surface combusting straw bales*. Riso national laboratory, Roskilde, Denmark.
7. Yoon, H., James, Wei, Norton, M. Denn. (1979). Feasible operating regions for moving-bed coal gasification reactors. *Ind. and Enng. Chem. Process. Des. and Develop.*, 18(2), 306—312.
8. Hiroaki, Watanabe, Ryoichi, Kurose. (2020). Modeling and simulation of coal gasification on an entrained flow coal gasifier. *Advanced Powder Technology*, 31(7), 2733—2741.
9. Scho, J., Joseph, B. (1981). Heterogeneous model for moving-bed coal gasification reactors. *Ind. and Eng. Chem. Des. and Develop.*, 20(2), 314—318.
10. Higman, C., Van der Burgt, M. (2008). *Gasification (Second edition)*. Elsevier.
11. Roberts, A. F. (1963). *Thermal decomposition of wood in an inert atmosphere*. Ninth symposium on Combustion. N.-York.
12. Gregory, D. R., Littlejohn, R. F. (1965). The British coal Utilization Research Association. *Monthly Bulletin*, 6.
13. Anthony, D. B., Howard, J. B. (1976). Coal devalatilization and hydro gasification. *AJChC Journal*.
14. Adánez, J., Abad, A., Mendiara, T., Gayán, P., Diego, L., & García-Labiano, F. (2018). Chemical looping combustion of solid fuels. *Progress in Energy and Combustion Science*, 65, 6—66. <https://doi.org/10.1016/J.PECS.2017.07.005>.
15. Kornienko, Y., Haidai, S., Stepaniuk, A., & Novokhat, O. (2024). Principles of simulation of energy-efficient granulation processes in a fluidized bed. *Energy Technologies & Resource Saving*. <https://doi.org/10.33070/etars.3.2024.08>.
16. Kinc, M., Joseph, B. (1983). Dynamic behavior of moving-bed coal gasifier. *Ind. and Eng. Chem. Des. and Develop.*, 22(2), 212—217.
17. Souza-Santos, M. (2004). *Solid Fuels Combustion and Gasification: Modeling, Simulation, and Equipment Operations*. <https://doi.org/10.1201/9780203027295>.