

ГАЗИФИКАЦИЯ ЖИДКИХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ОТХОДОВ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫМИ ПРОДУКТАМИ ГАЗОВОЙ ДЕТОНАЦИИ: ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ СОСТАВА И ТЕМПЕРАТУРЫ ПОЛУЧАЕМОГО СИНТЕЗ-ГАЗА

К. С. Панин¹, В. А. Сметанюк², С. М. Фролов³

Аннотация: Проведено термодинамическое моделирование процесса газификации жидких углеводородных отходов (ЖУО) в потоке высокотемпературного газифицирующего агента (ВГА). Источник ВГА — импульсно-детонационная пушка (ИДП). Основные компоненты ВГА — ультраперегретая смесь водяного пара и диоксида углерода с температурой продуктов детонации в состоянии Чепмена–Жуге или продуктов детонации, расширенных до атмосферного давления. В качестве горючего для ИДП использованы метан (стартовое горючее) и синтез-газ, полученный в результате газификации ЖУО. Для оптимизации состава получаемого синтез-газа рассмотрено влияние разбавления кислородной смеси стартового горючего водяным паром. Термодинамическое моделирование показало, что газификация ЖУО продуктами детонации позволяет добиться полной конверсии ЖУО в синтез-газ, состоящий исключительно из водорода и монооксида углерода, или в энергетический газ с высокими концентрациями метана и углеводородов C_2 – C_3 и низшей теплотой сгорания от 36,7 (кислородные смеси) до 13,6 МДж/кг (воздушные смеси). Получаемый синтез-газ в смеси с кислородом можно использовать для самозапитки ИДП, причем на самозапитку уходит около 33% получаемого синтез-газа. Для самозапитки ИДП смесью получаемого синтез-газа с воздухом требуется повышение давления в реакторе и/или обогащение воздуха кислородом. Добавление низкотемпературного водяного пара в исходную горючую смесь позволяет регулировать состав получаемого синтез-газа в широких пределах. Теоретически отношение H_2/CO может изменяться от 1,3 до 3,4.

Ключевые слова: импульсно-детонационная пушка; ультраперегретая смесь водяного пара и диоксида углерода; жидкие углеводородные отходы; газификация; синтез-газ

DOI: 10.30826/CE24170107

EDN: PDJMUU

Введение

Термическая переработка жидких/твердых органических отходов водой или водяным паром и диоксидом углерода считается конкурентоспособной и экономически эффективной технологией переработки отходов, особенно когда необходимое для переработки тепло получается экологически чистыми технологиями (плазменными, микроволновыми, солнечными и др.), отличными от сжигания сырья. Использование водяного пара и/или диоксида углерода в качестве газифицирующих агентов имеет ряд преимуществ. Во-первых, получаемый синтез-газ не разбавляется другими газами. Во-вторых, газификация отходов водяным паром/ CO_2 требует меньшего количества газифицирующего агента вследствие высоких значений их энтальпии. В-третьих, использование смеси H_2O/CO_2 позволяет управлять составом синтез-газа. В-четвертых,

использование водяного пара в качестве газифицирующего агента повышает экономическую эффективность. В-пятых, в отсутствие свободного кислорода синтез-газ не содержит диоксинов и фуранов, что облегчает проведение операций по газоочистке. В-шестых, количество водорода, получаемого при паровой газификации отходов, в несколько раз больше, чем при их воздушной газификации.

Эффективность процесса газификации тем выше, чем больше выход синтез-газа и чем меньше углерода остается в побочных продуктах (чем выше полнота конверсии углерода в CO). В зависимости от уровня температуры газификации все технологии газификации подразделяются на низкотемпературные и высокотемпературные технологии [1].

Низкотемпературную газификацию обычно проводят при температурах ниже $1000\text{ }^\circ\text{C}$ и получают синтез-газ, полукокс и шлак. При этом получа-

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, kostyapanin3@gmail.com

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, smetanuk@mail.ru

³Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

мый синтез-газ обычно загрязнен смолами и CO_2 . Основные недостатки всех существующих технологий низкотемпературной газификации водяным паром и CO_2 — это низкое качество синтез-газа ввиду высокого содержания смол и CO_2 , низкая эффективность газификации вследствие большого количества остающегося полукокса, сложность управления качеством синтез-газа, что обусловлено длительным временем пребывания сырья в реакторах-газификаторах, а также низкий выход синтез-газа, вызванный главным образом его частичным использованием в производстве тепла для газификации. Современные исследования и разработки в области низкотемпературной газификации в основном направлены на предварительную обработку сырья и повышение его реакционной способности [2]. Высокотемпературную газификацию обычно проводят при температурах газифицирующего агента выше $1200\text{ }^\circ\text{C}$, которые достигаются при использовании процессов горения, а также плазмы и солнечного излучения. При таких высоких температурах продуктами газификации являются высококачественный синтез-газ и шлак, причем получаемый синтез-газ состоит в основном из H_2 и CO , а содержание углеводородов выше C_1 – C_2 незначительно. Основные преимущества технологий газификации высокотемпературным водяным паром/ CO_2 — это высокое качество синтез-газа вследствие полного отсутствия или незначительного содержания смол и CO_2 , высокая эффективность газификации вследствие полного отсутствия или небольших остатков смол и полукокса, простота управления качеством синтез-газа благодаря короткому времени пребывания сырья в реакторе-газификаторе и высокий выход синтез-газа благодаря использованию внешних источников энергии для производства тепла, необходимого для газификации.

Особый интерес представляет предложенная в [3] новая технология газификации органических отходов ВГА на основе смеси водяного пара и диоксида углерода с температурой выше 1500 – $2000\text{ }^\circ\text{C}$. Способность такого ВГА газифицировать жидкие/твердые органические отходы, не оказывая негативного воздействия на окружающую среду, хорошо известна. При температуре выше $1500\text{ }^\circ\text{C}$ смолы и полукокс, образующиеся на начальных стадиях процесса газификации, полностью превращаются в синтез-газ, в идеале состоящий только из водорода и оксида углерода в пропорции, зависящей от сырья, тогда как охлажденный минеральный остаток состоит из безопасных простых оксидов и водных растворов бескислородных кислот, таких как HCl , HF , H_2S и др. и аммиак NH_3 [4–6]. Минеральный остаток можно использовать в качестве

добавок к строительным материалам, а кислоты можно отделять и концентрировать. Иными словами, новая технология газификации органических отходов потенциально позволяет их полную переработку в полезные продукты без выбросов в атмосферу и водоемы.

Материалы и методы

Технология

Сущность новой технологии газификации органических отходов с помощью ВГА состоит в том, что измельченные органические отходы, непрерывно подаваемые в зону газификации, подвергаются импульсно-периодическому воздействию ВГА, генерируемого в ИДП, а продукты газификации непрерывно истекают из проточного реактора-газификатора и направляются потребителю либо полностью, либо частично, если часть продуктов газификации используется для самозапитки ИДП. Импульсно-детонационная пушка представляет собой трубу с одним закрытым и другим открытым концом. Закрытый конец трубы снабжен патрубками для подачи горючего, окислителя и низкотемпературного пара (110 – $120\text{ }^\circ\text{C}$) из соответствующих коллекторов с регулирующими клапанами. Рабочий цикл начинается с подачи в ИДП компонентов горючей смеси: горючего (водород или любое углеводородное горючее), окислителя (кислород, воздух или воздух, обогащенный кислородом) и низкотемпературного пара в качестве возможного разбавителя. После зажигания горючей смеси свечой зажигания, ускорения пламени и перехода горения в детонацию по горючей смеси с очень большой скоростью (1700 – 2400 м/с) распространяется детонационная волна, которая превращает смесь в продукты детонации, состоящие в основном из водяного пара и диоксида углерода при очень высоких температуре и давлении. Когда детонационная волна выходит через открытый конец трубы в реактор-газификатор, высокотемпературный водяной пар и продукты детонации расширяются в реактор-газификатор в виде плотной высокоскоростной струи со скоростью в среднем выше 1000 м/с , а давление в ИДП снижается. Когда давление в ИДП снижается до давления в реакторе-газификаторе, через патрубки на закрытом конце трубы подается новая порция компонентов горючей смеси: горючего, окислителя и низкотемпературного пара. Когда ИДП заполняется горючей смесью, срабатывает свеча зажигания, и начинается следующий рабочий цикл. Продукты детонации кислородной смеси углеводородного горючего мо-

гут содержать такое количество ультраперегретых водяного пара и CO_2 , которого достаточно для полной газификации органического сырья, поэтому разбавление горючей смеси низкотемпературным водяным паром необязательно.

Генератор ВГА — ИДП — работает в импульсном режиме, причем частота импульсов в основном определяется временем заполнения трубы. Средние параметры выходящей струи ВГА (температура, состав, скорость и др.) определяются составом горючей смеси и степенью ее разбавления низкотемпературным паром. Импульсно-детонационная пушка присоединяется открытым торцом к проточному реактору-газификатору компактной геометрической формы, что позволяет избежать образования долгоживущих застойных зон, способствующих накоплению отходов и их шлакованию внутри реактора-газификатора. Импульсно-детонационные пушки желательно присоединять к газификатору попарно и располагать коаксиально друг напротив друга для создания сильных встречных ударных волн и мощных вихревых структур, способствующих увеличению времени пребывания частиц отходов и их карбонизированных остатков внутри реактора-газификатора. Импульсные ударные волны, выходящие из ИДП и обладающие огромной разрушительной силой, фрагментируют отходы на мельчайшие частицы, а также предотвращают агломерацию частиц и их прилипание к стенкам реактора-газификатора. Чтобы увеличить среднее время пребывания частиц отходов, можно использовать каскад реакторов-газификаторов, сообщающихся друг с другом через трубки, позволяющие газам и частицам перетекать из одного реактора-газификатора в другой. Во всех случаях среднее рабочее давление в реакторе(ах)-газификаторе(ах) должно быть немного выше атмосферного давления, чтобы предотвратить подсос атмосферного воздуха. В настоящее время такие установки для паровой газификации органических отходов, отвечающие специфическим требованиям с точки зрения рабочей температуры, времени пребывания сырья, состава получаемого синтез-газа и др., могут быть спроектированы, используя методы вычислительной газовой динамики [7] и модели равновесной газификации [8]. Технология реализована в экспериментальных установках и проверена на целом ряде органических отходов [6, 9–11].

Модели

На рис. 1 показаны 4 модели процесса газификации. В модели 1 (рис. 1, а) в ИДП подается горючее (метан), окислитель (кислород или воздух), водяной пар и сырье (ЖУО). Модель 2 (рис. 1, б) от-

личается от модели 1 только местом подачи сырья: сырье подается не в ИДП, а в реактор-газификатор. Модель 3 (рис. 1, в) такая же, как модель 1, только после выхода установки на режим включается самозапитка ИДП синтез-газом, получаемым в результате газификации сырья. Наконец, модель 4 (рис. 1, г) такая же, как модель 2, но после выхода установки на режим включается самозапитка ИДП синтез-газом, получаемым в результате газификации сырья.

Для полного моделирования процесса газификации ЖУО требуется проведение трехмерных газодинамических расчетов с кинетическими механизмами пиролиза и окисления ЖУО. Пример таких расчетов приведен в [7]. В данной работе проводится термодинамическое моделирование процесса газификации ЖУО. Для этого приняты следующие упрощающие допущения.

1. В качестве горючего для ИДП используется метан (модели 1 и 2) или метан как стартовое горючее и получаемый синтез-газ как основное горючее (модели 3 и 4). В качестве окислителя для ИДП используется кислород, воздух или воздух, обогащенный кислородом. Смесь горючего с окислителем поступает в ИДП при нормальных условиях ($P_0 = 1$ бар, $T_0 = 300$ К). В качестве разбавителя в ИДП может подаваться и водяной пар с параметрами $P_{0v} = 1$ бар, $T_{0v} = 400$ К.
2. В моделях 1 и 3 газификация сырья происходит при параметрах ВГА (температура, давление и состав), которые постоянны по времени и соответствуют состоянию продуктов детонации Чепмена–Жуге (ЧЖ). Следует иметь в виду, что это допущение завышает параметры ВГА из-за того, что продукты детонации расширяются в волне Зельдовича–Тэйлора.
3. В моделях 2 и 4 газификация сырья происходит при параметрах ВГА (температура, давление и состав), которые постоянны по времени и соответствуют состоянию продуктов детонации ЧЖ, расширенных до $P_0 = 1$ бар. Следует иметь в виду, что это допущение занижает параметры ВГА из-за того, что продукты детонации расширяются до давления $P_0 = 1$ бар в течение конечного интервала времени.
4. В качестве сырья (ЖУО) рассматривается *n*-гексадекан ($\text{C}_{16}\text{H}_{34}$), который часто используется как физический и химический суррогат смазочных масел [12]. Считается, что ЖУО поступает в реактор с температурой $T_0 = 300$ К. Теплота испарения *n*-гексадекана равна 0,36 МДж/кг.

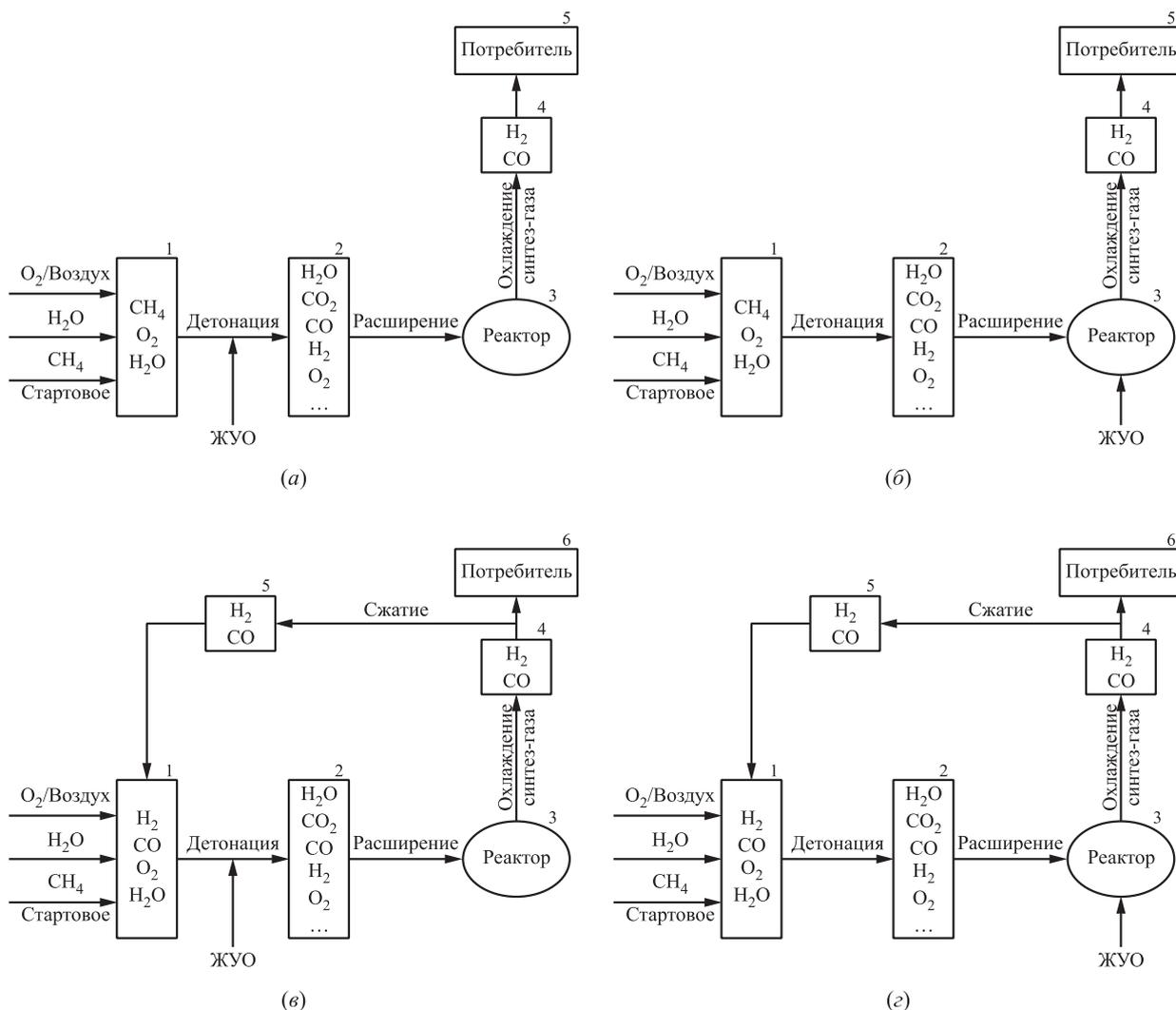


Рис. 1 Четыре модели процесса газификации: (а) модель 1 с подачей сырья в ИДП без самозапитки ИДП; (б) модель 2 с подачей сырья в реактор-газификатор без самозапитки ИДП; (в) модель 3 с подачей сырья в ИДП с самозапиткой ИДП получаемым синтез-газом; (г) модель 4 с подачей сырья в реактор-газификатор с самозапиткой ИДП получаемым синтез-газом

5. Смешение ЖУО с ВГА происходит мгновенно. Поскольку конечные температуры смеси значительно выше, чем температура кипения ЖУО, рассматривается исключительно газодвухфазное смешение.
6. Газификация ЖУО в ВГА происходит при постоянном давлении в отсутствие тепло- и массообмена с внешней средой.
7. Все реакции протекают в газовой фазе.

Моделирование проводится с помощью программного модуля SDToolbox [13] (для определения параметров продуктов детонации) и программного комплекса Santega [14] (для определения термодинамических параметров и состава получаемого синтез-газа) и разделено на три этапа.

На первом этапе с помощью программного модуля SDToolbox определяются параметры ВГА (давление, температура и состав продуктов детонации в точке ЧЖ). Равновесные параметры продуктов детонации, расширенных до давления $P_0 \leq P \leq P_{с.г.}$, определяются дополнительным решением задачи $S, P = const$.

На втором этапе проводится расчет температуры и состава смеси ВГА + ЖУО. Температура смеси определяется температурами компонентов и массовым соотношением ВГА и ЖУО.

На третьем этапе рассматривается конверсия полученной смеси ВГА + ЖУО в синтез-газ в проточном адиабатическом реакторе при постоянном давлении 1 бар (задача $H, P = const$) и определяют

ся термодинамически равновесные состав и температура получаемого синтез-газа.

В качестве целевого состава получаемого синтез-газа можно выбирать, например, состав с максимальным содержанием водорода или состав с максимальным содержанием метана. В дальнейшем для определенности синтез-газом будем называть газ, содержащий максимальное количество водорода, тогда как газ, содержащий максимальное количество метана, будем называть энергетическим газом.

Результаты расчетов

Чтобы получить представление о свойствах ВГА, получаемого с помощью газовой детонации метана и синтез-газа, в данном разделе сначала представлены параметры детонации и составы продуктов детонации смесей метан–кислород, метан – кислород – водяной пар, метан–воздух и метан – воздух, обогащенный кислородом, в состоянии ЧЖ (скорость, давление, температура, плотность и состав продуктов в состоянии ЧЖ) и в состояниях, получаемых при расширении продуктов детонации до давления $P_0 \leq P \leq P_{СЖ}$, а затем представлены расчеты параметров синтез-газа и энергетического газа, получаемых в моделях 1–4.

Параметры детонации смесей метан – кислород – азот – водяной пар

Стехиометрическая метанокислородная смесь

На рис. 2 представлены результаты расчетов равновесных состояний продуктов детонации не-

разбавленной стехиометрической метанокислородной смеси: от значений в точке ЧЖ (показаны кружками) до значений, соответствующих расширению продуктов детонации до $P_0 = 1$ бар (показаны квадратами). Расчетная скорость детонации ЧЖ 2382 м/с (число Маха $M_{СЖ} = 6,74$). Температура, давление и плотность продуктов детонации в состоянии ЧЖ составляют 3700 К, 29,4 бар и 2 кг/м³ соответственно. В составе продуктов детонации в состоянии ЧЖ имеются водяной пар (36 % (об.)), СО (16 % (об.)), СО₂ (10 % (об.)), Н₂ (8 % (об.)), О₂ (8 % (об.)), а также активные радикалы ОН, О и Н (суммарно 22 % (об.)). Температура продуктов детонации, расширенных до начального давления $P_0 = 1$ бар, составляет 2852 К. В составе расширенных продуктов детонации имеются водяной пар (48 % (об.)), СО (12 % (об.)), СО₂ (17 % (об.)), Н₂ (6 % (об.)), О₂ (7 % (об.)), а также активные радикалы ОН, О и Н (суммарно 10 % (об.)).

Стехиометрическая метанокислородная смесь, разбавленная водяным паром

На рис. 3 представлены результаты расчетов состава и температуры продуктов детонации стехиометрической метанокислородной смеси, в разной степени разбавленной водяным паром (до 40 % (об.) [15], в состоянии ЧЖ (рис. 3, а) и после расширения до $P_0 = 1$ бар (рис. 3, б). При разбавлении смеси водяным паром температура продуктов детонации снижается (от 3700 до 3080 К на рис. 3, а и от 2850 до 2450 К на рис. 3, б), концентрация водяного пара возрастает (от 36 до 70 % (об.) на рис. 3, а и от 48 до 74 % (об.) на рис. 3, б), а концентрация СО₂ остается приблизительно на том же

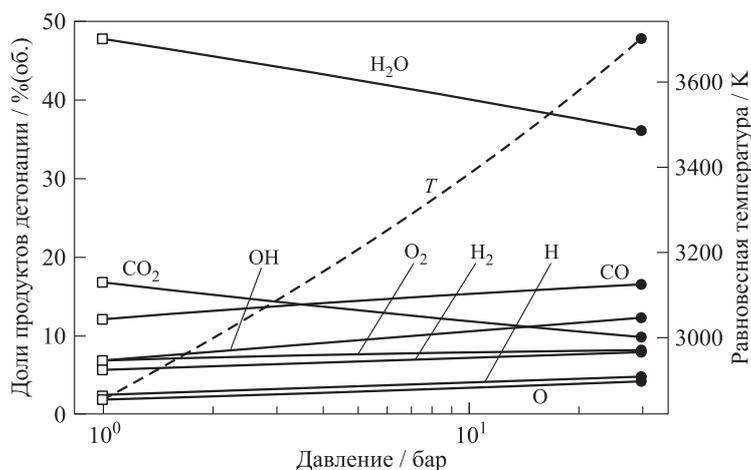


Рис. 2 Равновесные состояния продуктов детонации стехиометрической метанокислородной смеси — от значений в точке ЧЖ (показаны кружками) до значений, соответствующих $P_0 = 1$ бар (показаны квадратами): сплошные кривые — объемные доли компонентов; штриховая кривая — температура

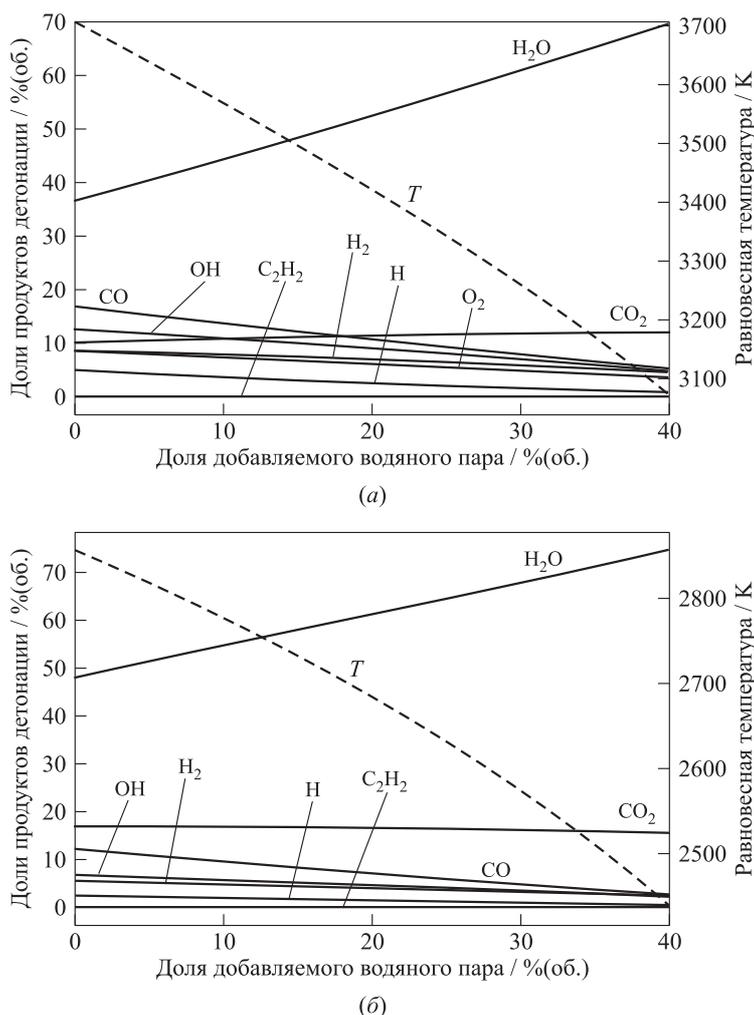


Рис. 3 Равновесные состояния продуктов детонации стехиометрической метано-кислородной смеси, разбавленной водяным паром от 0 до 40 % (об.), в состоянии ЧЖ (а) и после расширения до $P_0 = 1$ бар (б): сплошные кривые — объемные доли компонентов; штриховая кривая — температура

уровне (10–12 % (об.)) на рис. 3, а и 17–16 % (об.) на рис. 3, б).

Стехиометрическая метановоздушная смесь

На рис. 4 представлены результаты расчетов равновесных состояний продуктов детонации стехиометрической метановоздушной смеси: от значений в точке ЧЖ (показаны кружками) до значений, соответствующих расширению продуктов детонации до $P_0 = 1$ бар (показаны квадратами). Расчетная скорость детонации ЧЖ 1805 м/с (число Маха $M_{CJ} = 5,14$). Температура, давление и плотность продуктов детонации в состоянии ЧЖ равны 2782 К, 17,3 бар и 2 кг/м³ соответственно. В составе продуктов детонации в состоянии ЧЖ имеются водяной пар (17,1 % (об.)), CO (2,1 % (об.)), CO₂ (7,1 % (об.)), O₂ (1,2 % (об.)), H₂ (1 % (об.)), а также активные радикалы OH, O и H (суммар-

но 1,5 % (об.)), остальное азот (70 % (об.)). Температура продуктов детонации, расширенных до давления $P_0 = 1$ бар, составляет 1750 К. В составе расширенных продуктов детонации имеются водяной пар (19 % (об.)), CO₂ (9,5 % (об.)), остальное N₂ (71,5 % (об.)).

Стехиометрическая смесь метана с воздухом, обогащенным кислородом

На рис. 5 показана расчетная зависимость скорости детонации ЧЖ (рис. 5, а) и температуры продуктов детонации в точке ЧЖ и продуктов детонации, расширенных до $P_0 = 1$ бар (рис. 5, б), от концентрации кислорода в смеси метан–кислород–азот. При переходе от кислородной к воздушной смеси метана скорость детонации монотонно уменьшается с 2382 до 1805 м/с. Температура продуктов детонации ЧЖ уменьшается от 3703

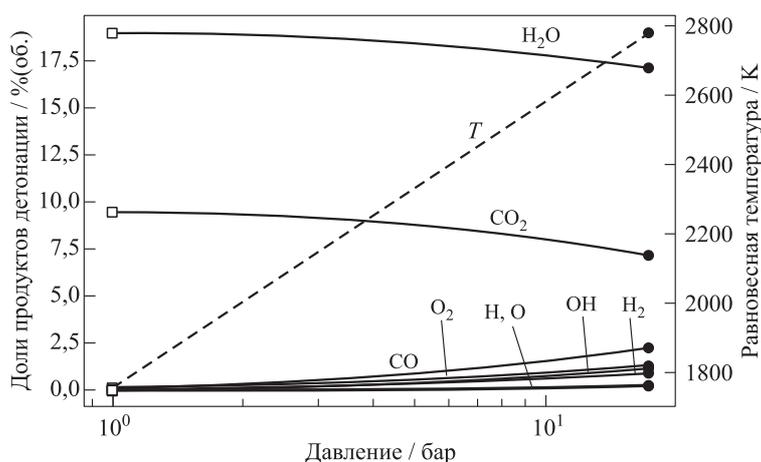


Рис. 4 Равновесные состояния продуктов детонации стехиометрической метановоздушной смеси — от значений в точке ЧЖ (показаны кружками) до значений, соответствующих расширению продуктов детонации до $P_0 = 1$ бар (показаны квадратами): сплошные кривые — объемные доли компонентов; штриховая кривая — температура

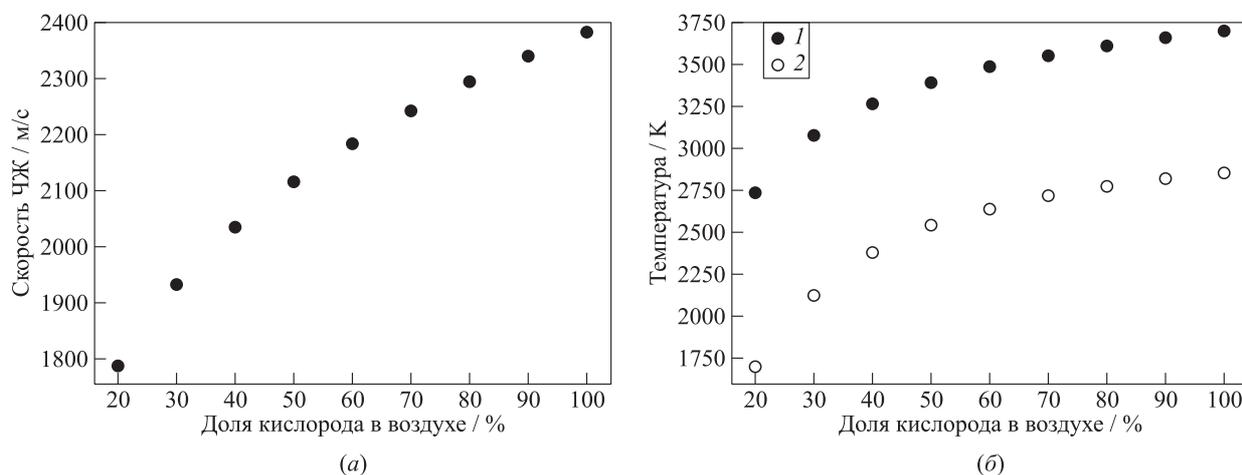


Рис. 5 Расчетная зависимость скорости детонации ЧЖ (а) и температуры продуктов детонации в точке ЧЖ (1) и продуктов детонации, расширенных до $P_0 = 1$ бар (2) (б), от концентрации кислорода в воздухе

до 2782 К, а температура продуктов детонации, расширенных до $P_0 = 1$ бар, уменьшается от 2852 до 1750 К.

Газификация жидких углеводородных отходов продуктами детонации стехиометрической кислородной смеси углеводородного горючего

Модель 1

На рис. 6, а представлены результаты расчетов равновесных состояний сухих продуктов газификации ЖУО в среде ВГА, получаемого детонацией стехиометрической метанокислородной смеси (см. рис. 2), при изменении массового отношения ЖУО и ВГА. В качестве целевых составов получаемых

сухих продуктов газификации можно определить два характерных состава, например состав с максимальным содержанием водорода (синтез-газ) или состав с максимальным содержанием метана (энергетический газ). На рис. 6 эти составы указаны стрелками. Синтез-газ с максимальным отношением $H_2/CO = 1,3$ получается при добавлении 0,53 кг ЖУО к 1 кг ВГА.

Синтез-газ характеризуется содержанием водорода 56,5 % (об. сух.) и CO 43,5 % (об. сух.) и низшей теплотой сгорания 19,4 МДж/кг. Равновесная температура продуктов газификации — около 1800 К. Если вместо массового отношения ЖУО и ВГА использовать массовое соотношение ЖУО и горючего (метана) (1 кг ВГА образуется при окислении 0,2 кг метана), то окажется, что с помощью 1 кг метана и 4 кг кислорода можно газифициро-

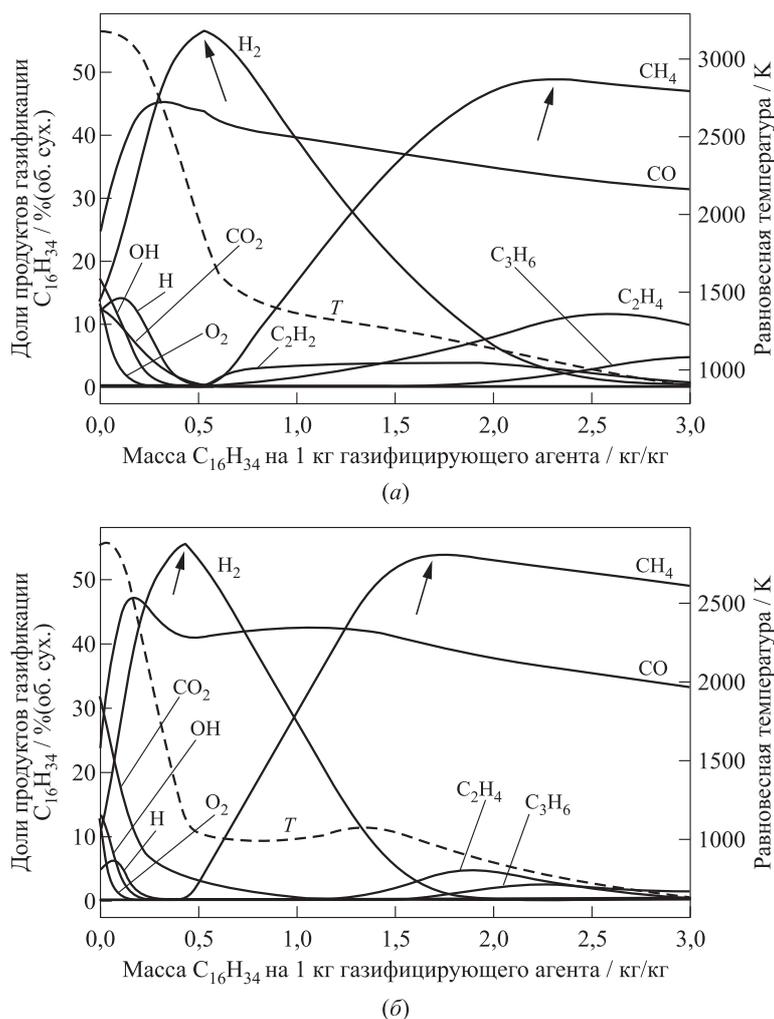


Рис. 6 Равновесные параметры сухих продуктов газификации ЖУО в среде ВГА при изменении массового отношения ЖУО и ВГА; газифицирующий агент — продукты детонации стехиометрической метанокислородной смеси в состоянии ЧЖ (а) и расширенные до атмосферного давления (б): сплошные кривые — объемные доли компонентов; штриховые кривые — температура. Стрелки показывают составы продуктов газификации с максимальным содержанием водорода и метана

вать 2,64 кг ЖУО и получить 7,64 кг синтез-газа указанного состава.

Чтобы получить энергетический газ с максимальным содержанием метана (49 % (об. сух.)), необходимо газифицировать 2,33 кг ЖУО с помощью 1 кг ВГА. Кроме метана получаемый энергетический газ будет содержать CO (33,5 % (об. сух.)), C₂H₄ (11 % (об. сух.)), C₂H₂ (2,5 % (об. сух.)), H₂ (2 % (об. сух.)) и C₃H₆ (2 % (об. сух.)). Низшая теплота сгорания такого энергетического газа равна 33,7 МДж/кг, а равновесная температура продуктов — 1039 К.

Если вместо массового отношения ЖУО и ВГА использовать массовое соотношение ЖУО и горючего (метана), то окажется, что с помощью 1 кг метана и 4 кг кислорода можно газифицировать

11,62 кг ЖУО и получить 16,62 кг энергетического газа указанного состава.

Модель 2

На рис. 6, б представлены результаты расчетов равновесных состояний сухих продуктов газификации ЖУО в среде ВГА, полученного расширением продуктов детонации неразбавленной метанокислородной смеси до давления $P_0 = 1$ бар (см. рис. 2), при изменении массового отношения ЖУО и ВГА.

В качестве целевого состава получаемых сухих продуктов газификации выберем, например, состав с максимальным содержанием водорода (синтез-газ) или состав с максимальным содержанием метана (энергетический газ).

В первом случае синтез-газ с отношением $H_2/CO = 1,35$ получается в результате газификации при добавлении 0,45 кг ЖУО к 1 кг ВГА. Такой синтез-газ характеризуется содержанием водорода 55,4%(об. сух.), CO 41%(об. сух.), CO₂ 3,4%(об. сух.), метана 0,2%(об. сух.), температурой 1121 К и низшей теплотой сгорания 19,9 МДж/кг.

Если вместо массового отношения ЖУО и ВГА использовать массовое соотношение ЖУО и горючего (метана), то окажется, что с помощью 1 кг метана и 4 кг кислорода можно газифицировать 2,2 кг ЖУО и получить 7,2 кг синтез-газа указанного состава.

Чтобы получить второй целевой состав с содержанием метана 53,9%(об. сух.), необходимо с помощью 1 кг ВГА газифицировать 1,73 кг ЖУО. Кроме метана такой энергетический газ будет содержать CO (39,3%(об. сух.)), H₂ (1,2%(об. сух.)), C₂H₄ (4%(об. сух.)), C₂H₂ (0,7%(об. сух.)) и C₃H₆ (0,8%(об. сух.)). Температура и низшая теплота сгорания такого газа равны 952 К и 33,6 МДж/кг соответственно.

Если вместо массового отношения ЖУО и ВГА использовать массовое соотношение ЖУО и горючего (метана), то окажется, что с помощью 1 кг метана и 4 кг кислорода можно газифицировать 8,63 кг ЖУО и получить 13,63 кг энергетического газа указанного состава.

Модель 3

Модель 3 подразумевает самозапитку ИДП получаемым синтез-газом, причем самозапитке предшествует работа ИДП на стартовом горючем (метане). Состав синтез-газа, получаемого детонацией метанокислородной смеси, можно определить из рис. 6, а. Для определения состава синтез-газа, получаемого с самозапиткой ИДГ, необходимо сначала заменить стартовое горючее (метан) на сухой

синтез-газ, полученный с использованием стартового горючего, а затем постепенно заменять горючее на получаемый сухой синтез-газ. Все эти манипуляции можно совершить, заменив сначала метан на синтез-газ полученного состава, затем смешать полученный синтез-газ с кислородом в стехиометрическом соотношении, организовать детонацию ЧЖ в такой смеси, использовать полученный ВГА для газификации ЖУО продуктами детонации, смешать полученный синтез-газ с кислородом в стехиометрическом соотношении и т.д. и т.п. В табл. 1 приведены расчетные параметры процесса газификации ЖУО с десятью циклами самозапитки ИДП стехиометрической смесью получаемого синтез-газа с кислородом. Из табл. 1 следует, во-первых, что скорость детонации стехиометрической кислородной смеси получаемого синтез-газа оказывается не ниже 2144 м/с, что лишь на 11% меньше скорости детонации стартового горючего (2383 м/с). Во-вторых, уже к 5–6-му циклу состав и температура получаемого синтез-газа стабилизируются: при добавлении 0,46 кг ЖУО к 1 кг ВГА в результате газификации получается синтез-газ с отношением $H_2/CO = 1,06$ и с температурой 1668 К, с большим содержанием водорода (51,5%(об. сух.)) и CO (48,5%(об. сух.)) и пренебрежимо малым содержанием CO₂, CH₄ и C₂H₂. Низшая теплота сгорания такого газа равна 17,8 МДж/кг. С помощью 1 кг такого синтез-газа и 1,06 кг кислорода можно газифицировать 1 кг ЖУО и получить 3,06 кг такого же синтез-газа, т.е. на конверсию 1 кг ЖУО в потоке ВГА необходимо затратить 32,6% получаемого синтез-газа.

Модель 4

Модель 4 также подразумевает самозапитку ИДП получаемым синтез-газом, причем, как и в модели 3, самозапитке ИДП предшествует ра-

Таблица 1 Параметры процесса газификации ЖУО с самозапиткой ИДП стехиометрической кислородной смесью получаемого синтез-газа (модель 3)

№ цикла	Скорость ЧЖ, м/с	Горючее	H ₂	CO	CO ₂	O ₂	CH ₄	C ₂ H ₂	H	OH	C ₂ H ₄	C ₃ H ₆	Температура, К	Количество ЖУО на 1 кг ВГА, кг/кг	Низшая теплота сгорания, МДж/кг
0	2382,7	CH ₄	0,564	0,435	0	0	0	0	0	0	0	0	1817,78	0,53	49,644
1	2192,6	Сингаз	0,531	0,469	0	0	0	0	0	0	0	0	1673,78	0,48	19,356
2	2159,1	Сингаз	0,519	0,480	0	0	0,001	0	0	0	0	0	1657,22	0,47	18,266
3	2149,9	Сингаз	0,516	0,483	0,001	0	0	0	0	0	0	0	1681,92	0,47	17,998
4	2144,6	Сингаз	0,515	0,485	0	0	0	0	0	0	0	0	1669,69	0,46	17,829
5	2143,9	Сингаз	0,515	0,485	0	0	0	0	0	0	0	0	1668,66	0,46	17,795
6	2143,8	Сингаз	0,515	0,485	0	0	0	0	0	0	0	0	1668,43	0,46	17,788
7	2143,7	Сингаз	0,515	0,485	0	0	0	0	0	0	0	0	1668,38	0,46	17,786
8	2143,7	Сингаз	0,515	0,485	0	0	0	0	0	0	0	0	1668,37	0,46	17,785
9	2143,7	Сингаз	0,515	0,485	0	0	0	0	0	0	0	0	1668,37	0,46	17,785
10	2143,7	Сингаз	0,515	0,485	0	0	0	0	0	0	0	0	1668,36	0,46	17,785

Таблица 2 Параметры процесса газификации ЖУО с самозапиткой ИДП стехиометрической кислородной смесью получаемого синтез-газа (модель 4)

№ цикла	Скорость ЧЖ, м/с	Горючее	H ₂	CO	CO ₂	O ₂	CH ₄	C ₂ H ₂	H	OH	C ₂ H ₄	C ₃ H ₆	Температура, К	Количество ЖУО на 1 кг ВГА, кг/кг	Низшая теплота сгорания, МДж/кг
0	2382,7	СН ₄	0,554	0,410	0,034	0	0,003	0	0	0	0	0	1121,37	0,45	49,644
1	2157,6	Сингаз	0,511	0,443	0,042	0	0,004	0	0	0	0	0	1095,57	0,40	19,870
2	2111,5	Сингаз	0,495	0,456	0,046	0	0,003	0	0	0	0	0	1100,24	0,38	18,642
3	2093,1	Сингаз	0,488	0,461	0,048	0	0,002	0	0	0	0	0	1109,73	0,37	18,135
4	2084,4	Сингаз	0,485	0,463	0,049	0	0,003	0	0	0	0	0	1097,91	0,37	17,901
5	2082,6	Сингаз	0,484	0,464	0,048	0	0,003	0	0	0	0	0	1095,66	0,37	17,876
6	2082,2	Сингаз	0,484	0,464	0,048	0	0,003	0	0	0	0	0	1095,17	0,37	17,866
7	2082,1	Сингаз	0,484	0,464	0,048	0	0,003	0	0	0	0	0	1095,06	0,37	17,863
8	2082,0	Сингаз	0,484	0,464	0,048	0	0,003	0	0	0	0	0	1095,03	0,37	17,861
9	2082,0	Сингаз	0,484	0,464	0,048	0	0,003	0	0	0	0	0	1095,02	0,37	17,861
10	2082,0	Сингаз	0,484	0,464	0,048	0	0,003	0	0	0	0	0	1095,02	0,37	17,861

бота установки на стартовом горючем (метане). Состав синтез-газа, получаемого детонацией метано-кислородной смеси, можно определить из рис. 6, б. Для определения состава синтез-газа, получаемого с самозапиткой ИДП, необходимо постепенно заменять стартовое горючее (метан) в ИДП на сухой синтез-газ, получаемый в результате газификации ЖУО. В табл. 2 приведены расчетные параметры процесса газификации ЖУО с десятью циклами самозапитки ИДП стехиометрической смесью получаемого синтез-газа с кислородом. Из табл. 2 следует, во-первых, что скорость детонации стехиометрической кислородной смеси получаемого синтез-газа оказывается не ниже 2082 м/с, что лишь на 14,5% меньше скорости детонации стартового горючего (2383 м/с). Во-вторых, уже к 8–9-му

циклу состав и температура получаемого синтез-газа стабилизируются: при добавлении 0,37 кг ЖУО к 1 кг ВГА в результате газификации получается синтез-газ с отношением $H_2/CO = 1,04$ и с температурой 1095 К, с большим содержанием водорода (48,4%(об. сух.)) и СО (46,4%(об. сух.)), малым содержанием CO_2 (4,8%(об. сух.)) и пренебрежимо малым содержанием углеводородов C_2 – C_3 . Низшая теплота сгорания такого синтез-газа равна 17,9 МДж/кг. С помощью 1 кг такого синтез-газа и 1,28 кг кислорода можно газифицировать 0,81 кг ЖУО и получить 3,09 кг такого же синтез-газа, т.е. на конверсию 1 кг ЖУО в потоке ВГА необходимо затратить 32,4% получаемого синтез-газа.

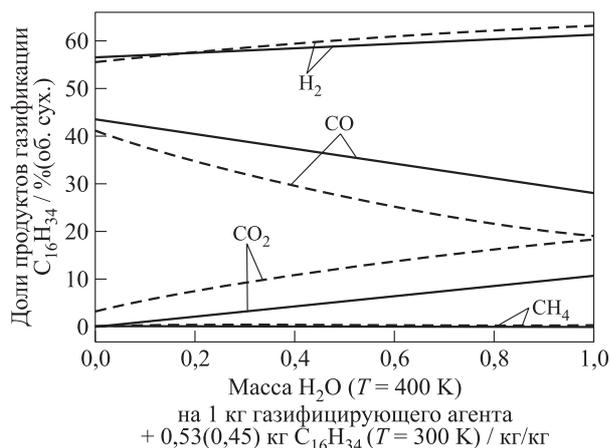


Рис. 7 Равновесные параметры сухих продуктов газификации ЖУО в среде ВГА при изменении степени разбавления стартового горючего (метана) водяным паром и массовом отношении ЖУО и ВГА с параметрами в точке ЧЖ (0,53 кг/кг, сплошные кривые) и расширенными до $P_0 = 1$ бар (0,45 кг/кг, штриховые кривые)

Газификация жидких углеводородных отходов продуктами детонации стехиометрической кислородной смеси углеводородного горючего, разбавленной водяным паром

Модели 1 и 2

На рис. 7 представлены результаты расчетов равновесных состояний сухих продуктов газификации ЖУО в среде ВГА с параметрами в точке ЧЖ (сплошные кривые) и в среде ВГА, расширенного до атмосферного давления (штриховые кривые) при массовом отношении ЖУО и ВГА 0,53 (сплошные кривые) и 0,45 (штриховые кривые), но при разном разбавлении горючей смеси водяным паром. С одной стороны, добавление водяного пара в кислородную смесь стартового горючего (метана) повышает долю H_2 в получаемом синтез-газе: в модели 1 содержание водорода увеличивается от 56,4 до 61,1%(об. сух.), а в модели 2 — от 55,4

до 62,8 % (об. сух.) С другой стороны, добавление водяного пара в кислородную смесь стартового горючего (метана) приводит к уменьшению доли СО и увеличению доли СО₂ в получаемом синтез-газе: в модели 1 содержание СО уменьшается от 43,5 до 28,1 % (об. сух.), а в модели 2 — от 41,2 до 18,6 % (об. сух.). Таким образом, добавление водяного пара в стехиометрическую метаноокислородную смесь позволяет регулировать значение отношения Н₂/СО в получаемом синтез-газе.

Газификация жидких углеводородных отходов продуктами детонации стехиометрической воздушной смеси углеводородного горючего

Модель 1

Интересно определить ожидаемый состав синтез-газа при замене кислорода на воздух в ИДП. В этом случае состав и температура ВГА для модели 1 определяются из рис. 4 (значения в состоянии ЧЖ). На рис. 8, а представлены результаты расчетов равновесных состояний сухих продуктов газификации ЖУО в среде такого ВГА при изменении массового отношения ЖУО и ВГА. Как и ранее, в качестве целевого состава получаемых сухих продуктов газификации выберем, например, состав с максимальным содержанием водорода (синтез-газ) или состав с максимальным содержанием метана (энергетический газ). На рис. 8 эти составы показаны стрелками. В первом случае при добавлении 0,15 кг ЖУО к 1 кг ВГА в результате газификации получается синтез-газ с отношением Н₂/СО = 1,3, с содержанием водорода 30,4 % (об. сух.), СО 23,8 % (об. сух.), азота 45,3 % (об. сух.) и метана 0,5 % (об. сух.) с температурой 1449 К и низшей теплотой сгорания 7,2 МДж/кг. Если вместо массового отношения ЖУО и ВГА использовать массовое соотношение ЖУО и метана, то окажется, что с помощью 1 кг метана и 17,3 кг воздуха можно газифицировать 2,74 кг ЖУО и получить 20,9 кг синтез-газа указанного состава. Расчетная скорость детонации стехиометрической смеси получаемого синтез-газа с воздухом равна 1724 м/с, что находится на уровне значений, реализуемых на практике для бедных и богатых топливно-воздушных смесей целого ряда углеводородных горючих. Во втором случае с помощью 1 кг ВГА можно газифицировать 0,67 кг ЖУО с получением энергетического газа с максимальным содержанием метана 30 % (об. сух.) и с содержанием СО 20 % (об. сух.), С₂Н₄ 7 % (об. сух.), С₂Н₂ 2 % (об. сух.), Н₂ 1 % (об. сух.), С₃Н₆ 2 % (об. сух.) и азота 38 % (об. сух.) с температурой 995 К и низшей теплотой сгорания 19,6 МДж/кг.

Модель 2

На рис. 8, б представлены результаты расчетов равновесных состояний продуктов газификации ЖУО в среде ВГА при изменении массового отношения ЖУО и ВГА. В качестве целевого состава получаемых сухих продуктов газификации выберем, например, состав с максимальным содержанием водорода (синтез-газ) или состав с максимальным содержанием метана (энергетический газ). В первом случае при добавлении 0,09 кг ЖУО к 1 кг ВГА в результате газификации получается синтез-газ с отношением Н₂/СО = 1,7 с содержанием водорода 23,7 % (об. сух.), СО 13,8 % (об. сух.), СО₂ 6,0 % (об. сух.), азота 55,5 % (об. сух.) и метана 1,0 % (об. сух.) с температурой 928 К и низшей теплотой сгорания 4,6 МДж/кг. Если вместо массового отношения ЖУО и ВГА использовать массовое соотношение ЖУО и метана, то окажется, что с помощью 1 кг метана и 17,2 кг воздуха можно газифицировать 1,65 кг ЖУО и получить 19,8 кг синтез-газа указанного состава. Расчетная скорость детонации стехиометрической смеси получаемого синтез-газа с воздухом равна 1802 м/с, что находится на уровне значений, реализуемых на практике для топливно-воздушных смесей целого ряда углеводородных горючих. Во втором случае с помощью 1 кг ВГА можно газифицировать 0,42 кг ЖУО с получением энергетического газа с содержанием метана 32,0 % (об. сух.), СО 23,3 % (об. сух.), С₂Н₄ 0,3 % (об. сух.) и азота 44,4 % (об. сух.) с температурой 763 К и низшей теплотой сгорания 13,6 МДж/кг.

Модель 3

Модель 3 подразумевает самозапитку ИДП получаемым синтез-газом, причем самозапитке предшествует работа установки на стартовом горючем (метане). Состав синтез-газа, получаемого детонацией метановоздушной смеси, можно определить из рис. 8, а. Для определения состава синтез-газа, получаемого с самозапиткой ИДП, необходимо постепенно заменять стартовое горючее (метан) в ИДП на сухой синтез-газ, получаемый в результате газификации ЖУО. Эти манипуляции можно совершить, заменив сначала метан на синтез-газ полученного состава, затем смешать полученный синтез-газ с воздухом в стехиометрическом соотношении, рассчитать параметры детонации ЧЖ для такой смеси, использовать полученный ВГА для газификации ЖУО продуктами детонации, смешать полученный синтез-газ с воздухом в стехиометрическом соотношении и т. д. и т. п.

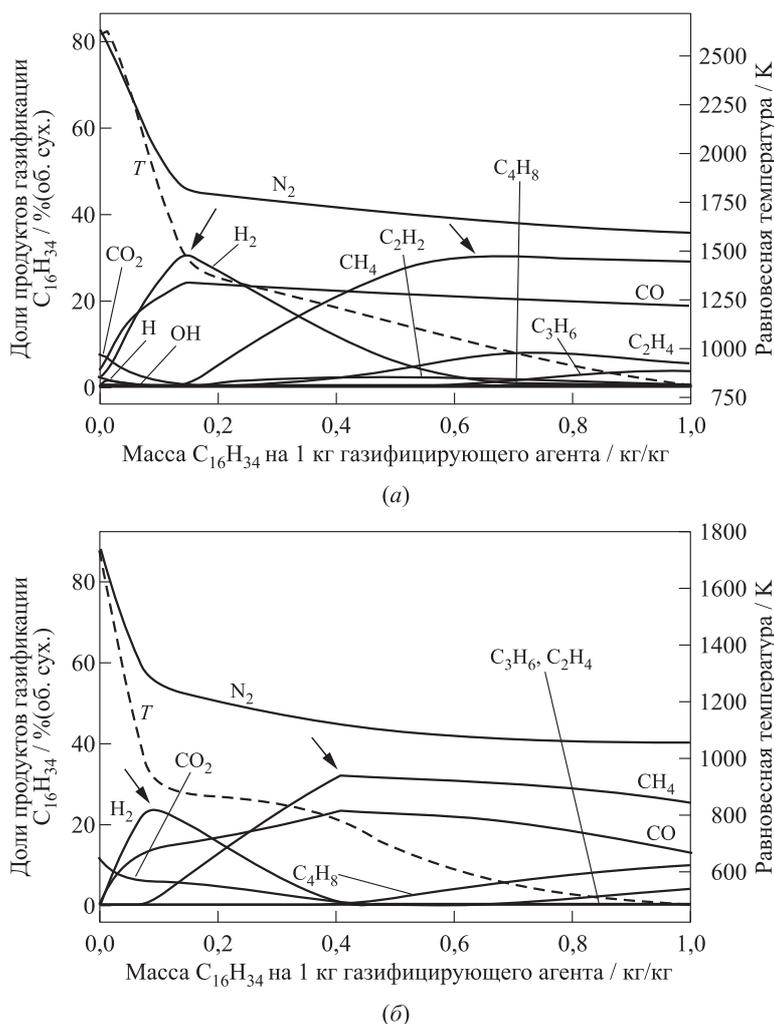


Рис. 8 Равновесные параметры продуктов газификации ЖУО в среде ВГА при изменении массового отношения ЖУО и ВГА. Газифицирующий агент — продукты детонации стехиометрической метановоздушной смеси в состоянии ЧЖ (а) и расширенные до атмосферного давления (б): сплошные кривые — объемные доли компонентов; штриховые кривые — температура. Стрелки показывают составы продуктов газификации с максимальным содержанием водорода и метана

В табл. 3 приведены расчетные параметры процесса газификации ЖУО с десятью циклами самозапитки ИДП стехиометрической смесью получаемого синтез-газа с воздухом. Из табл. 3 следует, во-первых, что скорость детонации стехиометрической воздушной смеси получаемого синтез-газа оказывается не ниже 1700 м/с, что лишь на 6% меньше скорости детонации стартового горючего (1802 м/с). Во-вторых, уже к 4–5-му циклу температура и состав получаемого синтез-газа стабилизируются: при добавлении 0,13 кг ЖУО к 1 кг ВГА в результате газификации получается 1,13 кг синтез-газа с отношением $H_2/CO = 1,06$ и с температурой 1340 К, с содержанием водорода 26,6% (об. сух.), CO 25,2% (об. сух.), CH_4 0,2% (об. сух.), азота 48% (об. сух.) и пренебрежимо

малым содержанием CO_2 и углеводородов C_2-C_3 . Низшая теплота сгорания такого синтез-газа равна 6,5 МДж/кг. С помощью 1 кг такого синтез-газа и 1,96 кг воздуха можно газифицировать 0,13 кг ЖУО и получить 3,09 кг такого же синтез-газа, т. е. на самозапитку ИДП уходит $1/3,09 = 32,4\%$ всего получаемого синтез-газа. Несмотря на то что скорость детонации получаемого синтез-газа находится на уровне значений, реализуемых для бедных и богатых топливно-воздушных смесей целого ряда углеводородных горючих, можно ожидать, что рабочий процесс по модели 3 все же проблематично реализовать на практике. Последнее связано с тем, что в модели 3 параметры ВГА соответствуют параметрам ЧЖ, которые существуют в течение очень короткого времени.

Таблица 3 Параметры процесса газификации ЖУО с самозапиткой ИДП стехиометрической воздушной смесью получаемого синтез-газа (модель 3)

№ цикла	Скорость ЧЖ, м/с	Горючее	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	C ₂ H ₂	N ₂	Температура, К	Количество ЖУО на 1 кг ВГА, кг/кг	Низшая теплота сгорания, МДж/кг
0	1801,5	CH ₄	0,304	0,238	0	0,005	0,001	0,453	1449,41	0,15	49,644
1	1724,2	Сингаз	0,276	0,245	0,002	0	0	0,478	1383,27	0,13	7,258
2	1706,1	Сингаз	0,270	0,250	0	0,001	0	0,479	1336,52	0,13	6,477
3	1705,0	Сингаз	0,267	0,251	0	0,001	0	0,480	1340,11	0,13	6,470
4	1704,3	Сингаз	0,266	0,252	0	0,002	0	0,480	1340,32	0,13	6,469
5	1704,1	Сингаз	0,266	0,252	0	0,002	0	0,480	1340,37	0,13	6,468
6	1704,1	Сингаз	0,266	0,252	0	0,002	0	0,480	1340,38	0,13	6,468
7	1704,0	Сингаз	0,266	0,252	0	0,002	0	0,480	1340,39	0,13	6,468
8	1704,0	Сингаз	0,266	0,252	0	0,002	0	0,480	1340,39	0,13	6,468
9	1704,0	Сингаз	0,266	0,252	0	0,002	0	0,480	1340,39	0,13	6,468
10	1704,0	Сингаз	0,266	0,252	0	0,002	0	0,480	1340,39	0,13	6,468

Модель 4

Модель 4 также подразумевает самозапитку ИДП получаемым синтез-газом, причем самозапитке предшествует работа установки на стартовом горючем (метане). Состав синтез-газа, получаемого детонацией метановоздушной смеси, можно определить из рис. 8, б. Для определения состава синтез-газа, получаемого с самозапиткой ИДП, необходимо постепенно заменять стартовое горючее (метан) в ИДП на сухой синтез-газ, получаемый в результате газификации ЖУО. Эти манипуляции можно совершить, постепенно заменяя метан на синтез-газ получаемого состава. Проведенные расчеты показали, что температура и состав получаемого синтез-

газа стабилизируются лишь к 14–15-му циклу: при добавлении ~ 0,03 кг ЖУО к 1 кг ВГА в результате газификации получается синтез-газ с отношением H₂/CO = 1,76 и с температурой 785 К (содержание водорода 7,1 % (об. сух.), CO 4,0 % (об. сух.), CO₂ 12,9 % (об. сух.), CH₄ 1,7 % (об. сух.) и азота 74,3 % (об. сух.)). Низшая теплота сгорания такого синтез-газа равна 1,5 МДж/кг, а расчетная скорость детонации стехиометрической воздушной смеси получаемого синтез-газа оказывается ниже 1300 м/с, что на 40% меньше скорости детонации стартового горючего (1802 м/с). Учитывая, что такая скорость детонации слишком мала для организации надежного рабочего процесса, а 3/4 состава газа — это азот, можно ожидать, что рабочий процесс по модели 4 на практике не реализуем.

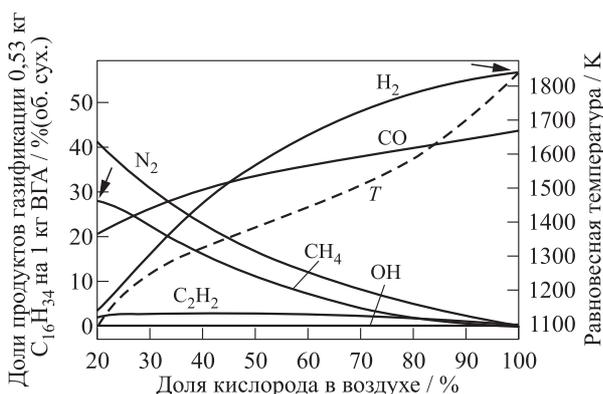


Рис. 9 Равновесные параметры сухих продуктов газификации ЖУО в среде ВГА при изменении концентрации кислорода в воздухе; газифицирующий агент — продукты детонации стехиометрической смеси метана с воздухом, обогащенным кислородом; массовое отношение ЖУО и ВГА равно 0,53 кг/кг; сплошные кривые — объемные доли компонентов; штриховая кривая — температура. Стрелки показывают составы с максимальным содержанием водорода и метана

Газификация жидких углеводородных отходов продуктами детонации стехиометрической смеси углеводородного горючего с воздухом, обогащенным кислородом

Модель 1

На рис. 9 представлены результаты расчетов равновесных состояний сухих продуктов газификации ЖУО с помощью ВГА, получаемого детонацией стехиометрической смеси метан–кислород–азот с разной концентрацией кислорода в воздухе, но при фиксированном массовом отношении ЖУО и ВГА (0,53). С ростом концентрации кислорода в воздухе содержание водорода и CO в получаемом синтез-газе монотонно возрастает, а концентрация метана убывает. Как и ранее, в качестве целевого состава получаемых сухих продуктов газификации можно выбирать, например, состав с максимальным содержанием водорода (синтез-газ) или состав с мак-

симальным содержанием метана (энергетический газ). На рис. 9 эти составы показаны стрелками. В первом случае максимальная концентрация водорода (56,5 % (об. сух.)) достигается при использовании чистого кислорода в качестве окислителя. Низшая теплота сгорания такого синтез-газа равна 19,4 МДж/кг. Во втором случае энергетический газ с максимальной концентрацией метана (28 % (об. сух.)) получается при концентрации кислорода 21 % (об. сух.). Низшая теплота сгорания такого газа равна 16,7 МДж/кг.

Модель 2

На рис. 10 представлены результаты расчетов равновесных состояний сухих продуктов газификации ЖУО с помощью ВГА, получаемого детонацией стехиометрической смеси метан–кислород–азот с разной концентрацией кислорода в воздухе, но при фиксированном массовом отношении ЖУО и ВГА (0,45 кг/кг). С ростом концентрации кислорода в смеси содержание водорода, СО и СО₂ в получаемом синтез-газе монотонно возрастает, а концентрация метана монотонно убывает (при концентрации кислорода выше 25 % (об. сух.)). Как и ранее, в качестве целевого состава получаемых сухих продуктов газификации можно выбирать, например, состав с максимальным содержанием водорода (синтез-газ) или состав с максимальным содержанием метана (энергетический газ). На рис. 10 эти составы показаны стрелками. В первом случае максимальная концентрация водорода (55,2 % (об. сух.)) достигается при использовании чистого кислорода в качестве окислителя. Низшая теплота сгорания такого син-

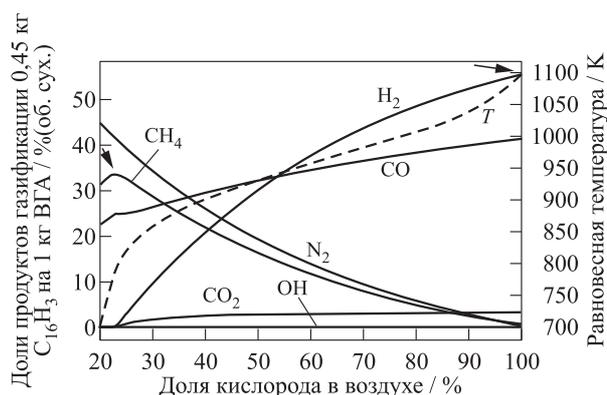


Рис. 10 Равновесные параметры сухих продуктов газификации ЖУО в среде ВГА при изменении концентрации кислорода в воздухе; газифицирующий агент — продукты детонации стехиометрической смеси метана с воздухом, обогащенным кислородом, расширенные до атмосферного давления; массовое отношение ЖУО и ВГА равно 0,45 кг/кг: сплошные кривые — объемные доли компонентов; штриховая кривая — температура. Стрелки показывают составы с максимальным содержанием водорода и метана

тез-газа равна 19,9 МДж/кг. Энергетический газ с максимальной концентрацией метана (33,6 % (об. сух.)) получается при концентрации кислорода 23 % (об. сух.). Низшая теплота сгорания такого газа равна 17,9 МДж/кг.

Модель 3

На рис. 11, а представлены результаты расчетов равновесных состояний сухих продуктов га-

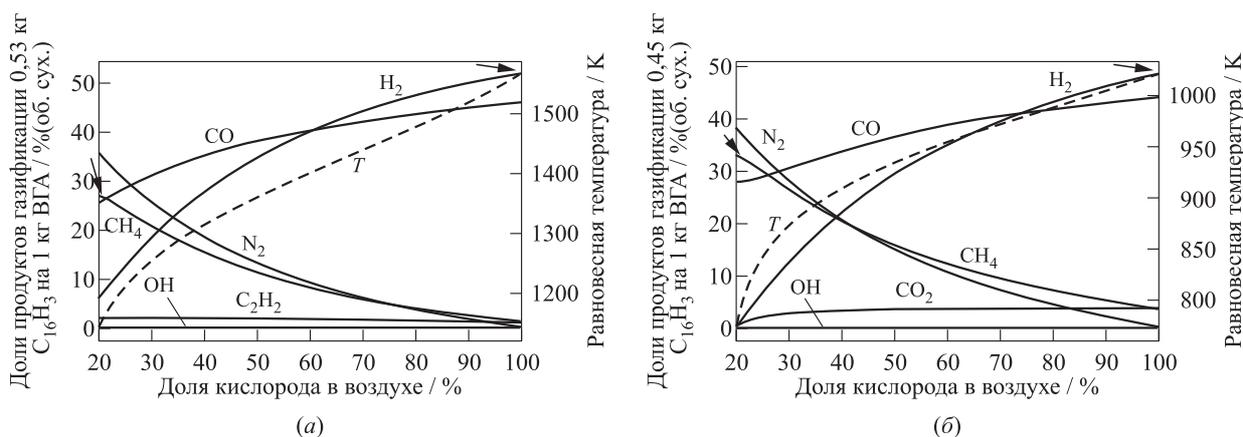


Рис. 11 Равновесные параметры сухих продуктов газификации ЖУО в среде ВГА при изменении концентрации кислорода в воздухе; газифицирующий агент — продукты детонации стехиометрической смеси синтез-газ (H₂CO = 1,3)–кислород–азот; массовое отношение ЖУО и ВГА равно 0,53 (а) и 0,45 (б): сплошные кривые — объемные доли компонентов; штриховая кривая — температура. Стрелки показывают составы с максимальным содержанием водорода и метана

зификации ЖУО с помощью ВГА, получаемого детонацией стехиометрической смеси синтез-газ ($H_2/CO = 1,3$) – кислород – азот с разной концентрацией кислорода в воздухе, но при фиксированном массовом отношении ЖУО и ВГА 0,53 кг/кг. С ростом концентрации кислорода в воздухе содержание водорода и СО в получаемом синтез-газе монотонно возрастает, а концентрация метана монотонно убывает. Как и ранее, в качестве целевого состава сухого синтез-газа, получаемого с самозапиткой ИДП, можно выбирать, например, состав с максимальным содержанием водорода (синтез-газ) или состав с максимальным содержанием метана (энергетический газ). На рис. 11, а эти составы показаны стрелками. В первом случае максимальная концентрация водорода (51,7 % (об. сух.)) достигается при использовании чистого кислорода в качестве окислителя. Низшая теплота сгорания такого синтез-газа равна 16,9 МДж/кг. Во втором случае энергетический газ с максимальной концентрацией метана (27 % (об. сух.)) получается при концентрации кислорода 21 % (об. сух.). Низшая теплота сгорания такого газа равна 19,5 МДж/кг.

Модель 4

На рис. 11, б представлены результаты расчетов равновесных состояний сухих продуктов газификации ЖУО с помощью ВГА, получаемого детонацией стехиометрической смеси синтез-газ ($H_2/CO = 1,3$) – кислород – азот с разной концентрацией кислорода в воздухе, но при фиксированном массовом отношении ЖУО и ВГА 0,45 кг/кг. С ростом концентрации кислорода в воздухе содержание водорода и СО в получаемом синтез-газе монотонно возрастает, а концентрация метана монотонно убывает. Как и ранее, в качестве целевого состава получаемых сухих продуктов газификации можно выбирать, например, состав с максимальным содержанием водорода (синтез-газ) или состав с максимальным содержанием метана (энергетический газ). В первом случае максимальная концентрация водорода (51 % (об. сух.)) достигается

при использовании чистого кислорода в качестве окислителя. Низшая теплота сгорания такого синтез-газа равна 16,7 МДж/кг. Во втором случае энергетический газ с максимальной концентрацией метана (34 % (об. сух.)) получается при концентрации кислорода 21 % (об. сух.) Низшая теплота сгорания такого газа равна 20,3 МДж/кг.

Обсуждение результатов

При использовании метана в качестве углеводородного горючего и кислорода в качестве окислителя для ИДП расчеты по моделям 1 и 2 показывают, что с помощью 1 кг метана и 4 кг кислорода можно газифицировать от 1,73 до 2,64 кг ЖУО и получить от 7,2 до 7,6 кг синтез-газа с содержанием водорода от 55,4 до 56,5 % (об. сух.) и СО от 41 до 43,5 % (об. сух.) (с отношением H_2/CO от 1,35 до 1,3) и с низшей теплотой сгорания от 19,4 до 19,9 МДж/кг. Если в качестве горючего для ИДП использовать получаемый синтез-газ по моделям 3 и 4, то затраты синтез-газа на самозапитку ИДП составят от 32,6% до 32,4%, т. е. приблизительно одну треть, а оставшиеся две трети получаемого синтез-газа могут быть направлены потребителю. Расчетные отношения H_2/CO и составы сухого синтез-газа, получаемого по моделям 3 и 4 представлены табл. 4.

Результаты термодинамических расчетов в табл. 4 можно сравнить с оценками на основе формальной реакции высокотемпературной газификации $C_{16}H_{34}$ в среде водяного пара и диоксида углерода с полной конверсией углерода в СО:



Легко показать, что стехиометрические коэффициенты такой реакции равны $a = 0,485$ и $b = 1,485$. Из записи реакции (1) следует, что с помощью 1 кг ВГА можно газифицировать 0,46 кг ЖУО и получить синтез-газ с отношением $H_2/CO = 1,06$ с содержанием водорода 51,5 % (об. сух.) и СО 48,5 % (об. сух.). В последней строке табл. 4 проведено сравнение этих результатов с результатами термодинамических расчетов по моделям 3 и 4. Полученные из (1)

Таблица 4 Сравнение параметров сухого синтез-газа при газификации ЖУО продуктами детонации стехиометрической кислородной смеси углеводородного горючего, рассчитанных по моделям 3 и 4 и по уравнению (1)

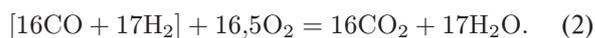
Расчет	H_2/CO	$[H_2]$, %(об. сух.)	$[CO]$, %(об. сух.)	$[CO_2]$, %(об. сух.)	$[CH_4]$, %(об. сух.)
Модель 3	1,06	51,5	48,5	0	0
Модель 4	1,04	48,4	46,4	4,8	0,3
Уравнение (1)	1,06	51,5	48,5	0	0

значения отношения H_2/CO и состав синтез-газа идеально согласуются с термодинамическими расчетами по модели 3. Что касается модели 4, для нее уравнение (1) несколько завышает качество получаемого синтез-газа, что связано с меньшим значением температуры газификации, чем в модели 3 (1095 вместо 1668 К). Вследствие пониженной температуры газификации синтез-газ в модели 4 содержит 4,8 % (об. сух.) CO_2 и 0,3 % (об. сух.) CH_4 .

Если процесс газификации ЖУО в модели 2 проводить при промежуточном давлении $P_0 \leq P \leq P_{CJ}$, следует иметь в виду, что с ростом давления P температура газификации увеличивается от 2852 до 3700 К и изменяется состав ВГА: концентрация водяного пара уменьшается от 48 до 36 % (об.), концентрация CO_2 уменьшается от 17 до 10 % (об.), концентрации CO и H_2 увеличиваются от 12 до 17 % (об.) и от 6 до 8 % (об.) соответственно, а также увеличивается концентрация радикалов OH , H и O (суммарно от 10 до 21 % (об.)) и концентрация молекулярного кислорода (от 7 до 8 % (об.)).

Если же метаноокислородную смесь в моделях 1 и 2 разбавлять водяным паром, следует иметь в виду, что с увеличением степени разбавления смеси от 0 до 40 % (об.) температура продуктов детонации в модели 1 снижается от 3700 до 3080 К, а в модели 2 — от 2850 до 2450 К, однако при этом содержание водяного пара в ВГА в модели 1 увеличивается от 36 до 70 % (об.), а в модели 2 — от 48 до 74 % (об.), концентрация же CO_2 остается приблизительно на том же уровне: 10–12 % (об.) и 17–16 % (об.) соответственно. Добавление водяного пара в метаноокислородную смесь в модели 1 повышает долю H_2 в получаемом синтез-газе от 56,4 до 61,1 % (об. сух.), а в модели 2 — от 55,4 до 62,8 % (об. сух.) и снижает долю CO в модели 1 от 43,5 до 28,1 % (об. сух.), а в модели 2 — от 41,2 до 18,6 % (об. сух.), таким образом изменяя отношение H_2/CO в получаемом синтез-газе от 1,3 до 2,2 в модели 1 и от 1,3 до 3,4 в модели 2.

Оценим теперь количество получаемого синтез-газа, используемого для самозапитки ИДП. Чтобы произвести ВГА в левой части реакции (1), необходимо затратить определенные количества получаемого синтез-газа и кислорода, которые можно определить из уравнения реакции:



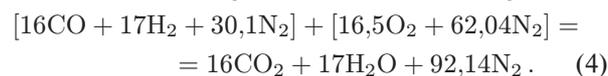
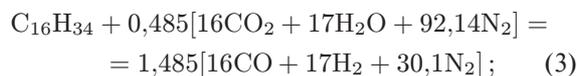
Из уравнения (2) следует, что для производства 1 кг ВГА необходимо затратить 0,48 кг синтез-газа и 0,52 кг кислорода. Используя результаты анализа уравнения (1), получаем, что для газификации 0,46 кг ЖУО необходимо затратить 0,48 кг синтез-газа и 0,52 кг кислорода. В результате газификации

получается $0,46 + 0,48 + 0,52 = 1,46$ кг синтез-газа, т. е. на самозапитку ИДП уходит 32,8% получаемого синтез-газа. Этот результат идеально согласуется с термодинамическим расчетом для модели 3, в котором на самозапитку ИДП уходит 32,6% получаемого синтез-газа. Что касается модели 4, то для нее оценочное количество синтез-газа, идущего на самозапитку ИДП, равно 32,4%, что также близко к значению 32,8%, полученному из уравнений реакций (1) и (2).

Если в качестве целевого продукта газификации отходов по моделям 1 и 2 рассматривать не синтез-газ, а энергетический газ, то с помощью 1 кг метана и 4 кг кислорода можно газифицировать от 8,63 до 11,62 кг отходов и получить от 13,63 до 16,62 кг энергетического газа с содержанием метана от 49 до 53,9 % (об. сух.), CO от 33,5 до 39,3 % (об. сух.), C_2H_4 от 4 до 11 % (об. сух.), C_2H_2 от 0,7 до 2,5 % (об. сух.), H_2 от 1,2 до 2 % (об. сух.), C_3H_6 от 0,8 до 2 % (об. сух.) и т. д., причем низшая теплота сгорания такого энергетического газа достигает 33,7 МДж/кг.

При использовании метана в качестве углеводородного горючего и воздуха в качестве окислителя для ИДП расчеты по моделям 1 и 2 показывают, что с помощью 1 кг метана и 17,2 кг воздуха можно газифицировать 1,65–2,74 кг ЖУО и получить 19,8–20,9 кг синтез-газа с содержанием водорода от 23,7 до 30,4 % (об. сух.) и CO от 13,8 до 23,8 % (об. сух.) (с отношением H_2/CO от 1,3 до 1,7) и с низшей теплотой сгорания от 4,6 до 7,3 МДж/кг. Если в качестве горючего для ИДП использовать получаемый синтез-газ по модели 3, то затраты синтез-газа на самозапитку ИДП составят 32,4%, т. е. приблизительно одну треть, а оставшиеся две трети получаемого синтез-газа могут быть направлены потребителю. Расчетное отношение H_2/CO и состав сухого синтез-газа, получаемого по модели 3, представлены в табл. 5.

Результаты термодинамического расчета в табл. 5 можно сравнить с оценками на основе формальных реакций:



Из (3) следует, что для газификации 1 кг ЖУО потребуется 7,7 кг ВГА с получением 8,7 кг синтез-газа, разбавленного азотом, с соотношением $H_2/CO = 1,06$ и с содержанием водорода 26,9 % (об. сух.), CO 25,4 % (об. сух.) и азота 47,7 % (об. сух.). В табл. 5 проведено сравнение

Таблица 5 Сравнение параметров сухого синтез-газа при газификации ЖУО продуктами детонации стехиометрической воздушной смеси углеводородного горючего, рассчитанных по модели 3 и по уравнению (3)

Расчет	H ₂ /CO	[H ₂], %(об. сух.)	[CO], %(об. сух.)	[CO ₂], %(об. сух.)	[CH ₄], %(об. сух.)	[N ₂], %(об. сух.)
Модель 3	1,06	26,6	25,2	0	0,2	48,0
Уравнение (3)	1,06	26,9	25,4	0	0	47,7

этих результатов с результатами термодинамического расчета по модели 3. Полученные из (3) значение H₂/CO и состав синтез-газа достаточно хорошо согласуются с термодинамическими расчетами по модели 3. В отличие от уравнения (3) в продуктах газификации по модели 3 в небольших количествах присутствует метан (0,2 %(об. сух.)), что связано с относительно низкой температурой продуктов газификации (1340 К). Из (3) и (4) следует, что для производства 1 кг ВГА необходимо затратить 0,369 кг синтез-газа и 0,631 кг воздуха, т.е. на самозапитку ИДП уходит $100 \cdot 7,7 \cdot 0,369 / 8,7 = 32,7\%$ получаемого синтез-газа. Этот результат удовлетворительно согласуется с результатами термодинамического расчета по модели 3 (32,4%). В связи с тем что в модели 3 параметры ВГА соответствуют параметрам ЧЖ, существующим в течение очень короткого времени, рабочий процесс по модели 3 реализовать на практике, по-видимому, проблематично: необходимо повышать температуру газификации за счет обогащения воздуха кислородом. Повышая давление в реакторе, можно реализовать на практике и процесс газификации сырья по модели 4. Например, при работе ИДП на стехиометрической метановоздушной смеси повышение давления в реакторе P приведет по модели 4 к увеличению температуры газификации от 1750 (при $P = P_0$) до 2782 К (при $P = P_{CJ}$), а при увеличении концентрации кислорода в воздухе скорость детонации такой смеси монотонно увеличится от 1805 до 2382 м/с, приводя к повышению температуры продуктов детонации от 2782 до 3700 К. С ростом давления в реакторе и/или концентрации кислорода в смеси содержание водорода и CO в получаемом синтез-газе в моделях 1 и 2 монотонно возрастает и можно ожидать, что при некоторых значениях давления в реакторе и/или концентрации кислорода в воздухе газификация ЖУО с самозапиткой ИДП получаемым синтез-газом станет практически возможной.

Если в качестве целевого продукта газификации ЖУО по моделям 1 и 2 рассматривать не синтез-газ, а энергетический газ, то с помощью 1 кг ВГА можно

газифицировать от 0,45 до 0,67 кг отходов и получить энергетический газ с содержанием метана от 30 до 32 %(об. сух.), CO от 20 до 23,3 %(об. сух.), азота от 38 до 44,4 %(об. сух.), C₂H₄ от 0,3 до 7 %(об. сух.), C₂H₂ от 0 до 2 %(об. сух.), H₂ от 0 до 1 %(об. сух.), C₃H₆ от 0 до 2 %(об. сух.) и т.д., причем низшая теплота сгорания такого энергетического газа изменяется от 13,6 до 19,6 МДж/кг.

Заключение

Проведено термодинамическое моделирование процесса газификации ЖУО высокотемпературным газифицирующим агентом в виде ультраперегретой смеси водяного пара и диоксида углерода, получаемой детонацией смеси углеводородное горючее – окислитель – газ-разбавитель в ИДП. В качестве ЖУО используется *n*-гексадекан, моделирующий моторное масло. В качестве углеводородного горючего используется метан или получаемый синтез-газ (смесь водорода и монооксида углерода). В качестве окислителя используется кислород, воздух или воздух, обогащенный кислородом. В качестве газа-разбавителя используется низкотемпературный водяной пар. Ниже приведены важнейшие полученные результаты.

1. Применение продуктов детонации стехиометрической метаноокислородной или метановоздушной смеси позволяет добиться полной конверсии жидких углеводородных отходов в синтез-газ, состоящий исключительно из водорода и монооксида углерода, или в энергетический газ с высокими концентрациями метана и углеводородов C₂–C₃ и низшей теплотой сгорания от 36,7 (кислородная смесь) до 13,6 МДж/кг (воздушная смесь).
2. Получаемый синтез-газ в смеси с кислородом можно использовать для самозапитки ИДП, причем на самозапитку уходит около 33% получаемого синтез-газа. Для самозапитки ИДП смесью получаемого синтез-газа с воздухом требуется повышение давления в реакторе и/или обогащение воздуха кислородом.

3. Применение продуктов детонации стехиометрической смеси получаемого синтез-газа с кислородом или с воздухом, обогащенным кислородом, также позволяет добиться полной конверсии ЖУО в синтез-газ, состоящий исключительно из водорода и монооксида углерода.
4. Добавление низкотемпературного водяного пара в исходную горючую смесь позволяет регулировать состав получаемого синтез-газа в широких пределах. Теоретически отношение H_2/CO может изменяться от 1,3 до 3,4.

Литература

1. Frolov S. M. Organic waste gasification: A selective review // *Fuels*, 2021. Vol. 2. P. 556–651. doi: 10.3390/fuels2040033.
2. Hess J. R., Ray A. E., Rials T. G. Advancements in biomass feedstock preprocessing: Conversion ready feedstocks // *Frontiers Energy Research*, 2020. Vol. 7. Article 140. 3 p.
3. Фролов С. М., Сметанюк В. А., Авдеев К. А., Хабатников С. А. Способ получения сильно перегретого пара и устройство детонационного парогенератора (варианты). Патент РФ № 2686138 от 24.04.2019. Приоритет от 26.02.2018.
4. Shahabuddin M., Alam M. T., Krishna B. B., Bhaskar T., Perkins G. A review on the production of renewable aviation fuels from the gasification of biomass and residual wastes // *Bioresource Technol.*, 2020. Vol. 312. P. 123596. doi: 10.1016/j.biortech.2020.123596.
5. Frolov S. M., Smetanyuk V. A., Sadykov I. A., Silantiev A. S., Shamshin I. O., Aksenov V. S., Avdeev K. A., Frolov F. S. Natural gas conversion and liquid/solid organic waste gasification by ultra-superheated steam // *Energies*, 2022. Vol. 15. P. 3616. doi: 10.3390/en15103616.
6. Frolov S. M., Smetanyuk V. A., Sadykov I. A., Silantiev A. S., Shamshin I. O., Aksenov V. S., Avdeev K. A., Frolov F. S. Natural gas conversion and organic waste gasification by detonation-born ultra-superheated steam: Effect of reactor volume // *Fuels*, 2022. Vol. 3. P. 375–391. doi: 10.3390/fuels3030024.
7. Фролов С. М., Сметанюк В. А., Сергеев С. С. Реактор для газификации отходов сильно перегретым водяным паром // *Докл. Акад. наук*, 2020. Т. 495. С. 71–76. doi: 10.31857/S2686953520060151.
8. Safarian S., Unnthorsson R., Richter C. Performance investigation of biomass gasification for syngas and hydrogen production using Aspen Plus // *Open J. Modelling Simulation*, 2022. Vol. 10. P. 71–87. doi: 10.4236/ojmsi.2022.102005.
9. Frolov S. M., Silantiev A. S., Sadykov I. A., et al. Composition and textural characteristics of char powders produced by thermomechanical processing of sunflower seed husks // *Powders*, 2023. Vol. 2. P. 624–638. doi: 10.3390/powders2030039.
10. Frolov S. M., Silantiev A. S., Sadykov I. A., Smetanyuk V. A., Frolov F. S., Hasiak J. K., Vorob'ev A. B., Inozemtsev A. V., Inozemtsev J. O. Gasification of waste machine oil by the ultra-superheated mixture of steam and carbon dioxide // *Waste*, 2023. Vol. 1. P. 515–531. doi: 10.3390/waste1020031.
11. Frolov S. M. Organic waste gasification by ultra-superheated steam // *Energies*, 2023. Vol. 16. P. 219. doi: 10.3390/en16010219.
12. Distaso E., Amirante R., Calò G., De Palma P., Tamburrano P., Reitz R. D. Predicting lubricant oil induced pre-ignition phenomena in modern gasoline engines: The reduced GasLube reaction mechanism // *Fuel*, 2020. Vol. 281. P. 118709. doi: 10.1016/j.fuel.2020.118709.
13. SDToolBox — numerical tools for shock and detonation wave modeling. <https://shepherd.caltech.edu/SDT>.
14. Goodwin D. G., Moffat H. K., Schoegl I., Speth R. L., Weber B. W. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. Version 3.0.0, 2023. doi: 10.5281/zenodo.8137090.
15. Frolov S. M., Smetanyuk V. A., Shamshin I. O., Sadykov I. A., Koval' A. S., Frolov F. S. Production of highly superheated steam by cyclic detonations of propane and methane–steam mixtures with oxygen for waste gasification // *Appl. Therm. Eng.*, 2021. Vol. 183. P. 116195. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2020.116195.

Поступила в редакцию 29.11.2023

GASIFICATION OF LIQUID HYDROCARBON WASTES BY HIGH-TEMPERATURE PRODUCTS OF GAS DETONATION: THERMODYNAMIC CALCULATIONS OF THE COMPOSITION AND TEMPERATURE OF THE RESULTING SYNGAS

K. S. Panin, V. A. Smetanyuk, and S. M. Frolov

N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow, 119991, Russian Federation

Abstract: The gasification process of liquid hydrocarbon waste (LHW) in the flow of a high-temperature gasifying agent (GA) is modeled thermodynamically. The source of the GA is a pulsed detonation gun (PDG). The GA is composed of the ultrasuperheated mixture of steam and carbon dioxide with the temperature of detonation products in the Chapman–Jouguet (CJ) state or those expanded to atmospheric pressure. Methane and syngas obtained as a result of LHW gasification are used as fuels for the PDG. To optimize the composition of the product syngas, the effect of diluting the fuel–oxygen mixture with steam in the PDG is considered. Thermodynamic modeling shows that gasification of LHW with detonation products allows achieving complete conversion of LHW into the syngas consisting exclusively of hydrogen and carbon monoxide or into the energy gas with high concentrations of methane and C₂–C₃ hydrocarbons and a lower heating value ranging from 36.7 (for mixtures with oxygen) to 13.6 MJ/kg (for mixtures with air). The resulting syngas mixed with oxygen can be used for self-feeding of the PDG: about 33% of the product syngas is then directed for self-feeding. To self-feed the PDG with a mixture of the product syngas and air, it is necessary to increase the pressure in the reactor and/or enrich the air with oxygen. The addition of low-temperature steam to the initial combustible mixture allows variation of the composition of the product syngas within a wide range. Theoretically, the H₂/CO ratio can be varied from 1.3 to 3.4.

Keywords: pulsed detonation gun; ultrasuperheated mixture of steam and carbon dioxide; liquid hydrocarbon waste; gasification; syngas

DOI: 10.30826/CE24170107

EDN: PDJMUU

Figure Captions

Figure 1 Four models of the gasification process: (a) model 1 with the supply of feedstock to the PDG without syngas self-feeding; (b) model 2 with the supply of feedstock to the reactor-gasifier without syngas self-feeding; (c) model 3 with the supply of feedstock to the PDG with syngas self-feeding; and (d) model 4 with the supply of feedstock to the reactor-gasifier with syngas self-feeding

Figure 2 Equilibrium states of detonation products of the stoichiometric methane–oxygen mixture — from values at the CJ point (circles) to values corresponding to $P_0 = 1$ bar (squares): solid curves — component volume fractions; and dashed curve — temperature

Figure 3 Equilibrium states of detonation products of the stoichiometric methane–oxygen mixture with steam dilution from 0 to 40 % (vol.) in the CJ state (a) and after expansion to $P_0 = 1$ bar (b): solid curves — component volume fractions; and dashed curve — temperature

Figure 4 Equilibrium states of detonation products of the stoichiometric methane–air mixture — from values at the CJ point (circles) to values corresponding to $P_0 = 1$ bar (squares): solid curves — component volume fractions; and dashed curve — temperature

Figure 5 Calculated dependence of CJ detonation velocity (a) and temperature of the detonation products at the CJ point (1) and the detonation products expanded to $P_0 = 1$ bar (2) (b) on the oxygen concentration in air

Figure 6 Equilibrium parameters of the dry products of LHW gasification as a function of the LHW-to-GA mass ratio; GA is represented by the detonation products of the stoichiometric methane–oxygen mixture in the CJ state (a) and expanded to atmospheric pressure (b): solid curves — component volume fractions; and dashed curves — temperature. The arrows show the compositions of gasification products with the maximum content of hydrogen and methane

Figure 7 Equilibrium parameters of the dry products of LHW gasification as a function of the methane dilution with steam with GA parameters at the CJ state (0.53 kg/kg, solid curves) and $P_0 = 1$ bar (0.45 kg/kg, dashed curves)

Figure 8 Equilibrium parameters of the dry products of LHW gasification as a function of the LHW-to-GA mass ratio; GA is represented by the detonation products of the stoichiometric methane–air mixture in the CJ state (a) and expanded to $P_0 = 1$ bar (b); solid curves — component volume fractions; and dashed curves — temperature. The arrows show the compositions of gasification products with the maximum content of hydrogen and methane

Figure 9 Equilibrium parameters of the dry products of LHW gasification as a function of oxygen concentration in air; GA is represented by the detonation products of the stoichiometric mixture of methane with oxygen-enriched air; the LHW-to-GA mass ratio is 0.53 kg/kg; solid curves — component volume fractions; and dashed curves — temperature. The arrows show the compositions of gasification products with the maximum content of hydrogen and methane

Figure 10 Equilibrium parameters of the dry products of LHW gasification as a function of oxygen concentration in the air; GA is represented by the detonation products of the stoichiometric mixture of methane with oxygen-enriched air expanded to $P_0 = 1$ bar; the LHW-to-GA mass ratio is 0.45 kg/kg; solid curves — component volume fractions; and dashed curves — temperature. The arrows show the compositions of gasification products with the maximum content of hydrogen and methane

Figure 11 Equilibrium parameters of the dry products of LHW gasification as a function of oxygen concentration in the air; GA is represented by the detonation products of the stoichiometric syngas ($H_2/CO = 1.3$) – oxygen – nitrogen mixture; the LHW-to-GA mass ratio is 0.53 (a) and 0.45 kg/kg (b); solid curves — component volume fractions; and dashed curves — temperature. The arrows show the compositions of gasification products with the maximum content of hydrogen and methane

Table Captions

Table 1 Parameters of the LHW gasification process with self-feeding of the PDG with the stoichiometric mixture of the product syngas and oxygen (model 3)

Table 2 Parameters of the LHW gasification process with self-feeding of the PDG with the stoichiometric mixture of the product syngas and oxygen (model 4)

Table 3 Parameters of the LHW gasification process with self-feeding of the PDG with the stoichiometric mixture of the product syngas and air (model 3)

Table 4 Self-feeding of the PDG with the stoichiometric mixture of the product syngas and oxygen: comparison of dry syngas parameters calculated by models 3 and 4 and by Eq. (1)

Table 5 Self-feeding of the PDG with the stoichiometric mixture of the product syngas and air: comparison of dry syngas parameters calculated by model 3 and by Eq. (3)

References

1. Frolov, S. M. 2021. Organic waste gasification: A selective review. *Fuels* 2:556–651. doi: 10.3390/fuels2040033.
2. Hess, J. R., A. E. Ray, and T. G. Rials. 2020. Advancements in biomass feedstock preprocessing: Conversion ready feedstocks. *Frontiers Energy Research* 7:140. 3 p.
3. Frolov, S. M., V. A. Smetanyuk, K. A. Avdeev, and S. A. Nabatnikov. February 26, 2018. Sposob polucheniya sil'no peregretoogo para i ustroystvo detonatsionnogo parogeneratora (varianty) [Method for obtaining highly overheated steam and detonation steam generator device (options)]. Patent of Russian Federation No. 2686138, April 24, 2019.
4. Shahabuddin, M., M. T. Alam, B. B. Krishna, T. Bhaskar, and G. Perkins. 2020. A review on the production of renewable aviation fuels from the gasification of biomass and residual wastes. *Bioresour Technol.* 312:123596. doi: 10.1016/j.biortech.2020.123596.
5. Frolov, S. M., V. A. Smetanyuk, I. A. Sadykov, A. S. Silantiev, I. O. Shamshin, V. S. Aksenov, K. A. Avdeev, and F. S. Frolov. 2022. Natural gas conversion and liquid/solid organic waste gasification by ultra-superheated steam. *Energies* 15:3616. doi: 10.3390/en15103616.
6. Frolov, S. M., V. A. Smetanyuk, I. A. Sadykov, A. S. Silantiev, I. O. Shamshin, V. S. Aksenov, K. A. Avdeev, and F. S. Frolov. 2022. Natural gas conversion and organic waste gasification by detonation-born ultra-superheated steam: Effect of reactor volume. *Fuels* 3:375–391. doi: 10.3390/fuels3030024.
7. Frolov, S. M., V. A. Smetanyuk, and S. S. Sergeev. 2020. Reactor for waste gasification with highly superheated steam. *Dokl. Phys. Chem.* 495(2):191–195. doi: 10.1134/S0012501620120039.
8. Safarian, S., R. Unnthorsson, and C. Richter. 2022. Performance investigation of biomass gasification for syngas and hydrogen production using Aspen Plus. *Open J. Modelling Simulation* 10:71–87. doi: 10.4236/ojmsi.2022.102005.
9. Frolov, S. M., A. S. Silantiev, I. A. Sadykov, et al. 2023. Composition and textural characteristics of char powders produced by thermomechanical processing of sunflower seed husks. *Powders* 2:624–638. doi: 10.3390/powders2030039.

10. Frolov, S. M., A. S. Silantiev, I. A. Sadykov, V. A. Smetanyuk, F. S. Frolov, Y. K. Hasiak, A. B. Vorob'ev, A. V. Inozemtsev, and J. O. Inozemtsev. 2023. Gasification of waste machine oil by the ultra-superheated mixture of steam and carbon dioxide. *Waste* 1:515–531. doi: 10.3390/waste1020031.
11. Frolov, S. M. 2023. Organic waste gasification by ultra-superheated steam. *Energies* 16:219. doi: 10.3390/en16010219.
12. Distaso, E., R. Amirante, G. Calò, P. De Palma, P. Tamburrano, and R. D. Reitz. 2020. Predicting lubricant oil induced pre-ignition phenomena in modern gasoline engines: The reduced GasLube reaction mechanism. *Fuel* 281:118709. doi: 10.1016/j.fuel.2020.118709.
13. SDToolBox — numerical tools for shock and detonation wave modeling. Available at: <https://shepherd.caltech.edu/SDT> (accessed February 19, 2024).
14. Goodwin, D. G., H. K. Moffat, I. Schoegl, R. L. Speth, and B. W. Weber. 2023. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. Version 3.0.0. doi: 10.5281/zenodo.8137090.
15. Frolov, S. M., V. A. Smetanyuk, I. O. Shamshin, I. A. Sadykov, A. S. Koval, and F. S. Frolov. 2021. Production of highly superheated steam by cyclic detonations of propane and methane–steam mixtures with oxygen for waste gasification. *Appl. Therm. Eng.* 183:116195. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2020.116195.

Received November 29, 2023

Contributors

Panin Konstantin S. (b. 2001) — student, National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Sh., Moscow 115409, Russian Federation; kostyapanin3@gmail.com

Smetanyuk Victor A. (b. 1978) — Candidate of Science in physics and mathematics, leading research scientist, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; research scientist, Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovskii Prosp., Moscow 117218, Russian Federation; smetanuk@chph.ras.ru

Frolov Sergey M. (b. 1959) — Doctor of Science in physics and mathematics, head of department, head of laboratory, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; professor, National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Sh., Moscow 115409, Russian Federation; senior research scientist, Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovskii Prosp., Moscow 117218, Russian Federation; smfrol@chph.ras.ru