

Krzysztof JASTRZĄB*, Olaf PIOTROWSKI**

Analiza możliwości wykorzystania ciepła z reaktorów HTR w procesie zgazowania paliw kopalnych za pomocą ditlenku węgla

STRESZCZENIE. W pracy przedstawiono wyniki rozważań teoretycznych nad możliwością wykorzystania energii pochodzącej z wysokotemperaturowych reaktorów jądrowych (HTR) do prowadzenia silnie endotermicznego procesu zgazowania paliw kopalnych za pomocą ditlenku węgla. Otrzymany w tym procesie gaz syntezowy mógłby być wykorzystany do syntez chemicznych np. produkcji metanolu, bądź płynnych paliw syntetycznych. Równocześnie praktyczna realizacja takiego procesu pozwoliłoby na ograniczenie emisji ditlenku węgla do atmosfery. Następowaloby to w dwójnasób: poprzez ograniczenie ilości spalane go paliwa (węgla) niezbędne go do realizacji procesu, jak również poprzez wykorzystanie ditlenku węgla jako substratu. Niestety ograniczeniem takiego rozwiązania jest względnie niska temperatura czynników grzewczych pochodzących z reaktora HTR ($< 800^{\circ}\text{C}$), co niekorzystnie wpływa na równowagę procesu zgazowania. W celu oceny opłacalności realizacji analizowanego procesu opracowano metodykę obliczenia składu równowagowego powstającego gazu syntezowego. Założono, że proces zgazowania węgla (paliwa) zachodzi w dwóch następujących po sobie etapach. Są to: szybka piroliza paliwa, połączona z wytworzeniem gazu popirolitycznego i karbonizatu, a następnie zgazowanie powstałego karbonizatu mieszaniną czynników zgazowujących (CO_2 , H_2O , O_2) i gazów popirolitycznych. Dla takiego układu stworzono model chemiczny, umożliwiający na podstawie bilansu stechiometrycznego i danych termodynamicznych obliczenie składu równowagowego mieszaniny poreakcyjnej. Opracowana metodyka umożliwia wykonanie obliczeń dla dowolnego gatunku węgla przy zastosowaniu mieszaniny ditlenku węgla, pary wodnej i tlenu o dowolnych proporcjach i nadmiarze w stosunku do ilości zgazowywanego węgla. Niezbędna jest do tego jedynie znajomość

* Dr inż., ** Mgr inż. – Instytut Chemicznej Przeróbki Węgla, Zabrze.

podstawowych właściwości fizykochemicznych paliwa oraz zależności składu gazów popirolitycznych i wydajności pirolizy od temperatury. W pracy przedstawiono wyniki przykładowych obliczeń składu równowagowego w zakresie 600–900°C. Odpowiada to temperaturze czynnika grzewczego pochodzącego z reaktora HTR. Analiza wpływu różnych czynników (np. rodzaju węgla, temperatury, składu początkowego czynników zgazowujących) pozwoli dokonać optymalizacji procesu zgazowania pod kątem minimalizacji zużycia tlenu oraz uzyskania gazów o dużej zawartości wodoru czy też doboru węgla o najlepszych właściwościach do niskotemperaturowego zgazowania.

SŁOWA KLUCZOWE: ditlenek węgla, HTR, zgazowanie węgla, gaz syntezowy

Wprowadzenie

Rosnące zapotrzebowanie na energię powoduje wzmożone zainteresowanie techniką jądrową. W klasycznych elektrowniach atomowych ciepło, powstające podczas rozszczepienia jąder atomowych służy do wytworzenia przegrzanej pary wodnej. Czynnik ten wykorzystywany jest do wytwarzania energii elektrycznej w turbinach parowych analogicznie jak w klasycznych elektrowniach ciepłych. Dzisiejsze elektrownie jądrowe wykorzystują reaktory typu SMR (*Small Molekular Reaktor*), które mają szanse na komercyjny wdrożenie w perspektywie najbliższych lat. Należą do nich LWR i HTR (Vujića i in. 2012).

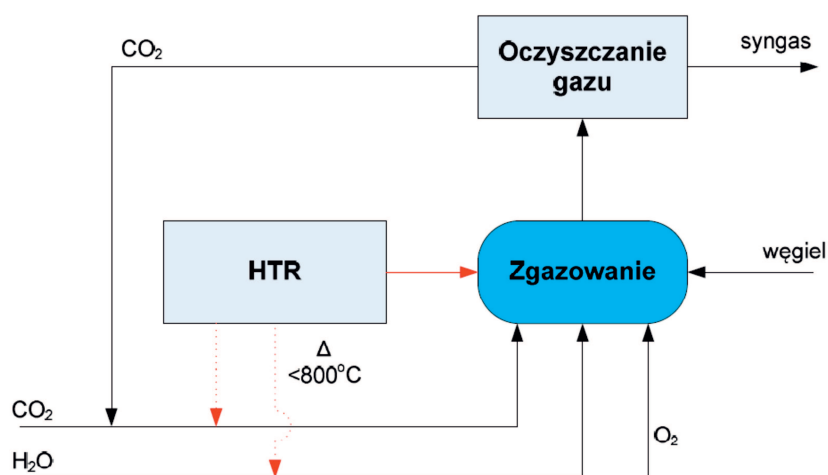
LWR (*Light Water Reactor*) wytwarza parę wodną o temperaturze około 300°C. W ostatnich latach intensywnie rozwijane są technologie jądrowe, mające na celu uzyskanie czynników grzewczych o znacznie wyższej temperaturze, co pozwoliłoby na ich zastosowanie w szeregu wysokotemperaturowych technologii. Kolejnym z rozwiązań są reaktory wysokotemperaturowe typu HTR (*High Temperature Reactor*) chłodzone gazowym helem (stąd w USA oznaczany HTGR – *High Temperature Gas Reactor*). Wspomniany reaktor nadaje się do kogeneracji ciepła procesowego dla zastosowań przemysłowych. Ich współczesne projekty oparte są na dwóch podstawowych założeniach (Kuhr 2008):

- ✧ ograniczenie mocy do kilkuset megawatów cieplnych,
- ✧ możliwość produkcji wysokoprężnej pary wodnej o wysokiej temperaturze ($T > 750^{\circ}\text{C}$).

Prototyp reaktora HTR pracował niegdyś w Julich (Niemcy) obecnie jeden działa w Japonii (Hayakawa 2004), kolejne budowane są w Chinach. W USA prace prowadzi konsorcjum NGNP (*New Generation Nuclear Power*) (Herring i in. 2007), gdzie wiodącą rolę odgrywa amerykański oddział AREVA. W Europie prace studialne koordynuje Nuclear Cogeneration Working Group w ramach SNE-TP (*Sustainable Nuclear Energy Technology Platform*) (Samul i in. 2013). Prace nad wdrożeniem reaktorów typu HTR są również od kilku lat prowadzone w Polsce. Aktualnie realizowany jest strategiczny projekt badawczy koordynowany przez AGH, a finansowany przez NCBiR pt. „Technologie wspomagające rozwój bezpiecznej energetyki jądrowej. Rozwój wysokotemperaturowych reaktorów do zastosowań przemysłowych” o akronimie HTRPL. W ramach tego projektu w Instytucie Chemicznej Przeróbki Węgla w Zabrze prowadzone są badania mające na celu wykorzysta-

nie ciepła pochodzącego z reaktorów HTR do syntez chemicznych, w których stosowany jest ditlenek węgla. Badania takie, zwane racjonalnym zagospodarowaniem CO₂, pozwolą w przyszłości na znaczące ograniczenie efektu cieplarnianego. Po pierwsze, emisja CO₂ zostanie zredukowana poprzez zastąpienie klasycznych elektrowni węglowych za pomocą elektrowni jądrowych. Po drugie, wytworzony już ditlenek węgla zostanie związany w procesach chemicznych w nowe produkty.

Jednym z procesów, w których można wykorzystać ciepło HTR, jest zgazowanie węgla za pomocą CO₂. Idea klasycznego procesu zgazowania węgla polega na działaniu mieszaniną czynników zgazowujących (powietrze, tlen, para wodna) na stałe paliwa kopalne (Strugała i in. 2011; Chmielniak i in. 2012). Jako produkt uzyskuje się gaz syntezowy (syngaz), który może być wykorzystany do syntez chemicznych, bądź też jako paliwo (wodór). Niestety, zgazowanie paliw jest procesem silnie endotermicznym o dużym zapotrzebowaniu na energię. Wymaga ponadto stosowania gazowego tlenu, co znacząco decyduje o ekonomice i opłacalności procesu. Alternatywnym rozwiązaniem jest proces zwany suchym zgazowaniem węgla. Jako czynnik zgazowujący w tym procesie wykorzystuje się gazowy ditlenek węgla. Wstępne obliczenia termodynamiczne wykazały, że taka realizacja procesu pozwala na zwiększenie wydajności i poprawę ekonomiki produkcji gazu syntezowego, m.in. poprzez obniżenie zużycia paliwa (węgla) oraz tlenu. Niezmiernie istotne jest również znaczące obniżenie emisji CO₂ do atmosfery. Wykorzystanie CO₂ do zgazowania węgla może zmniejszyć zużycie tlenu nawet o 30%. Przy wykorzystaniu ciepła pochodzącego z reaktorów HTR do ogrzania strumieni czynników zgazowujących (tzw. zgazowanie allotermiczne) oszczędności drogiego tlenu byłyby jeszcze większe, a być może udałoby się całkowicie wyeliminować potrzebę jego stosowania. Ideę takiego procesu przedstawiono na rysunku 1.



Rys. 1. Otrzymywanie syngazu poprzez zgazowanie węgla CO₂ przy wykorzystaniu ciepła z reaktora HTR

Fig. 1. Idea of synthesis gas production by CO₂ coal gasification with excess heat from HTR reactor

Dla zweryfikowania zasadności przedstawionej idei niezbędne jest wykonanie teoretycznych obliczeń modelowych procesu zgazowania różnych gatunków węgla kopalnych mieszaniną ditlenku węgla, pary wodnej i tlenu o różnych udziałach molowych poszczególnych składników. Szczególnie ważne są obliczenia w zakresie niskich temperatur 600–900°C, odpowiadających temperaturze czynnika grzewczego z reaktora HTR. Wykonanie takich obliczeń wymagało opracowania metodyki określenia składu równowagowego fazy gazowej w procesie zgazowania w zależności od temperatury i składu mieszaniny zgazowującej. Stanowi to podstawowy cel prezentowanego opracowania.

2. Metodyka obliczeń składu równowagowego

2.1. Mechanizm procesu zgazowania węgla

Proces zgazowania paliw stałych jest bardzo złożony. W celu wykonania obliczeń składu równowagowego założono, że zgazowanie przebiega w dwóch etapach: szybkiej pirolizy węgla (kopaliny), a następnie zgazowania wytworzonego karbonizatu. Szybkość ogólna procesu jest limitowana przez przebieg etapu zgazowania karbonizatu. Obliczenia termodynamiczne można prowadzić zatem dla quasi-statycznego układu heterogenicznego, w którym ustala się równowaga pomiędzy fazą stałą (węgiel + popiół) a fazą gazową, będącą mieszaniną gazowych czynników zgazowujących oraz gazów popirolitycznych. W praktyce są to:

- ✧ czynniki zgazowujące: CO_2 , H_2O oraz O_2 , dodawane celowo; ich ilość zależy od wsadu węglowego,
- ✧ mieszanina gazów popirolitycznych: H_2 , CO , CO_2 , H_2O , CH_4 , C_2H_6 , BTX (węglowodorów ciekłych) i substancji smolistych; ich ilość i stężenie jest funkcją temperatury procesu.

Rozpatrywanie wszystkich składników frakcji BTX i smoły jako reagentów niezmiernie utrudniłoby opis procesu. Z tego powodu posłużono się pewnymi uproszczeniami. Na podstawie przeciętnego składu substancji smolistych i frakcji BTX przyjęto, że skład substancji smolistych najbardziej zbliżony jest do naftalenu C_{10}H_8 , a frakcja BTX składa się wyłącznie z benzenu C_6H_6 . Można zatem przyjąć, że w rozpatrywanym układzie faza gazowa składa się z dziewięciu reagentów: O_2 , CO_2 , H_2O , CO , H_2 , CH_4 , C_2H_6 , BTX (C_6H_6) i smoła (C_{10}H_8). Ich ilość i stężenie zmienia się w czasie. Skład fazy gazowej stabilizuje się po osiągnięciu stanu równowagi chemicznej, będącego funkcją temperatury.

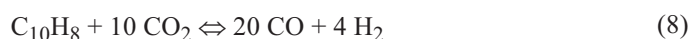
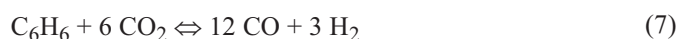
2.2. Określenie liczby reakcji niezależnych

Do określenia liczby reakcji niezależnych, umożliwiających pełny opis procesu, zastosowano *macierz współczynników atomowych* (macierz chemiczną). Przy założeniu, że mie-

szanina reakcyjna składa się z $i = 10$ składników (popiół, NH_3 i H_2S pominięto), oraz że poszczególne reagenty zbudowane są z trzech pierwiastków (C, H, O), wyznaczono rząd macierzy chemicznej $n = 3$, odpowiadający liczbie niezależnych składników układu. Pozwala to na określenie liczby reakcji niezależnych:

$$R = i - n = 10 - 3 = 7 \quad (1)$$

Do obliczeń stechiometrycznych i termodynamicznych można zastosować dowolny układ 7 reakcji wiążących ze sobą wszystkie reagenty. Z uwagi na założenie, że zgazowanie będzie się odbywało przede wszystkim za pomocą ditlenku węgla, do dalszych obliczeń przyjęto następujący model stechiometryczny:



Należy podkreślić, że opisany model (reakcje 2 – 8) nie ma większego sensu chemicznego i służy jedynie do bilansowania procesu. Tworzy również podstawę do jego analizy termodynamicznej i obliczenia składu równowagowego. W dalszych obliczeniach poszczególne reakcje oznaczano indeksem dolnym j , który przyjmuje wartości od 1 do 7. Z kolei indeksem dolnym i oznaczano kolejne reagenty ($i = 1 \dots 10$). Przyjęto następujące oznaczenia reagentów:

1 – H_2 , 2 – O_2 , 3 – CO , 4 – CO_2 , 5 – H_2O , 6 – CH_4 , 7 – C_2H_6 , 8 – C_6H_6 , 9 – C_{10}H_8 oraz 10 – C

2.3. Bilans stechiometryczny procesu

Bilans stechiometryczny zgazowania węgla prowadzono, traktując ten proces jako złożony proces heterogeniczny. W takim przypadku każdą fazę należy bilansować oddzielnie.

Szczególnie ważny jest bilans fazy gazowej, gdyż na jego podstawie można określić jej skład równowagowy, co jest podstawowym celem obliczeń.

Dla każdej niezależnej reakcji chemicznej j wprowadzono bezwymiarową liczbę postępu reakcji ξ_j :

$$\xi_j = \frac{\Delta n_{ij}}{v_{ij} F_{on}}; \quad j = 1..7 \quad (9)$$

gdzie: Δn_{ij} – przyrost liczby moli reagenta i w reakcji j ,
 v_{ij} – współczynnik stechiometryczny reagenta i w reakcji j ,
 F_{on} – początkowa sumaryczna ilość moli wszystkich reagentów

Następnie przeprowadzono bilans stechiometryczny procesu, określając ułamek molowy reagenta i w stanie równowagi (10 równań dla reagentów $i = 1..10$):

$$x_i^* = \frac{n_i}{F_n} = \frac{x_{oi} + \sum_{j=1}^7 v_{ij} \xi_j^*}{1 + \sum_{j=1}^7 \Delta v_j \xi_j^*} \quad (10)$$

gdzie: $n_i = F_{on} \left(x_{oi} + \sum_{j=1}^7 v_{ij} \xi_j^* \right)$ – ilość moli reagenta i ,
 $F_n = F_{on} \left(1 + \sum_{j=1}^7 \Delta v_j \xi_j^* \right)$ – sumaryczna ilość moli wszystkich reagentów; $\Delta v_j = \sum_{i=1}^9 v_{ij}$.

2.4. Obliczanie składu równowagowego fazy gazowej

Korzystając z danych termodynamicznych, dla każdej reakcji niezależnej j wyznaczono zależności stałej równowagi K_{apj} od temperatury. W warunkach procesu można przyjąć, że jest ona równa przybliżonej stałej ułamkowej K_{xj} . Dla każdej reakcji niezależnej rozpisano prawo działania mas w warunkach równowagi chemicznej (x_i^* – równowagowy ułamek molowy reagenta i):

$$K_{xj} = \prod (x_i^*)^{v_{ij}} \quad (11)$$

Po podstawieniu odpowiednich zależności równowagowych, uzyskano siedem zależności opisujących warunki równowagi z siedmioma niewiadomymi $\xi_1^* - \xi_7^*$:

$$K_{xj} = \frac{\prod \left(x_{oi} + \sum_j^R v_{ij} \xi_j^* \right)^{v_{ij}}}{\left(1 + \sum_j^R \Delta v_j \xi_j^* \right)^{\Delta v_j}}, \quad j = 1..7 \quad (12)$$

Do rozpisane go układu równań podstawia się obliczone wcześniej wartości liczbowe stałych równowagi w danej temperaturze oraz założony początkowy skład mieszaniny gazowej ($x_{o1} - x_{o9}$). Rozwiązanie układu równań pozwala wyznaczyć niewiadome $\xi_1^* - \xi_7^*$. Ze względu na złożoność obliczenia muszą być dokonane na drodze numerycznej. Otrzymane wartości podstawione do rozpisanych powyżej zależności $x_i^* = f(x_{oi}, \xi_1^*, \dots, \xi_7^*)$ pozwalają na ustalenie składu równowagowego mieszaniny reakcyjnej. W praktyce są to stężenia wszystkich reagentów występujących w fazie gazowej: H₂, O₂, CO, CO₂, H₂O, CH₄, C₂H₆, C₆H₆ oraz C₁₀H₈ zależne od temperatury procesu i składu początkowego mieszaniny reakcyjnej.

3. Wyniki przykładowych obliczeń

Wykorzystując przedstawioną metodykę wykonano obliczenia składu równowagowego dla kilku gatunków węgla. Były to zarówno węgle kamienne (energetyczne i koksujące) jak i węgle brunatne. Poniżej przedstawiono wyniki obliczeń dla węgla brunatnego z kopalni Bełchatów. W tabeli 1 zestawiono podstawowe właściwości fizykochemiczne. Natomiast na rysunkach 2 oraz 3 przedstawiono zależności składu gazów po pirolizie od temperatury oraz wydajność pirolizy od temperatury.

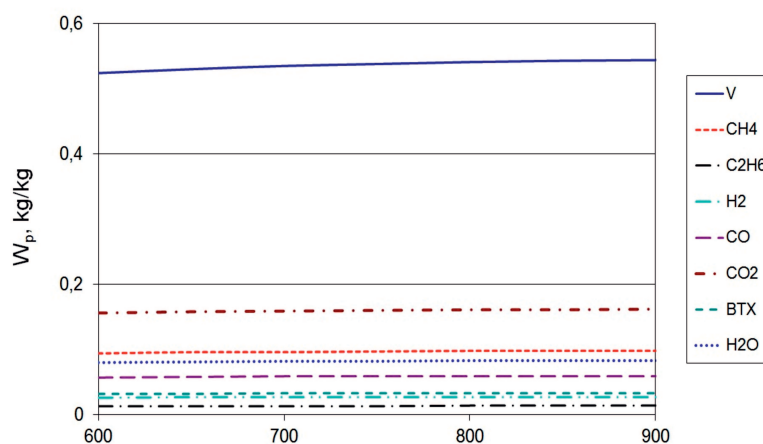
Przedstawiane zależności posłużyły do obliczania rzeczywistego składu początkowego fazy gazowej. Na podstawie ilości powstającego podczas pirolizy karbonizatu określano zapotrzebowanie na czynniki zgazowujące (CO₂, H₂O, O₂). Wartość tę korygowano przy uwzględnieniu ilości składników gazowych powstających podczas szybkiej pirolizy węgla w danej temperaturze. Wyniki przykładowych obliczeń składu równowagowego w temperaturze 800°C i stosunku czynników zgazowujących CO₂ i H₂O wynoszącym 1:1 przedstawiono na rysunku 4.

Analiza prezentowanych wyników wykazuje, że wzrost temperatury korzystnie wpływa na skład otrzymanego gazu syntezowego. Proces zgazowania najkorzystniej jest prowadzić w temperaturze powyżej 750°C. W mieszaninie poreakcyjnej jest wówczas stosunkowo niewiele nieprzereagowanego ditlenku węgla. Do praktycznej realizacji procesu niezbędny jest dodatek pary wodnej jako czynnika zgazowującego. Powoduje to wzrost ilości wytworzonego tlenku węgla CO, dodatkowo powstaje również wodór.

TABELA 1. Właściwości fizykochemiczne węgla brunatnego z kopalni Bełchatów

TABLE 1. Physicochemical parameters of lignite from Bełchatów mine

Parametr	Symbol	Jednostka	Wartość
Wilgoć	W^a	%	12,30
Popiół	A^a	%	21,10
Części lotne	V^a	%	36,50
Węgiel	C^a	%	45,48
Wodór	H^a	%	4,95
Azot	N^a	%	0,51
Siarka palna	S_c^a	%	0,54
Tlen	O_d^a	%	15,12
Ciepło spalania	Q_s^{daf}	MJ/kg	30,30

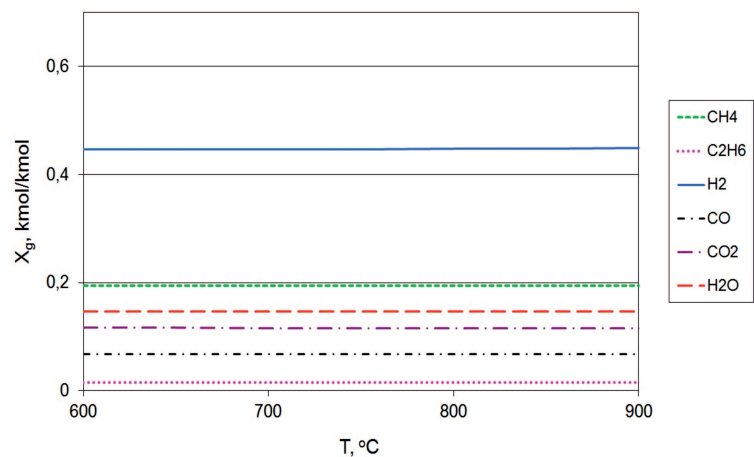


Rys. 2. Zależność wydajności produktów pirolizy W_p węgla brunatnego z kopalni Bełchatów od temperatury T [kg/kg]

Fig. 2. Dependence of the efficiency of the pyrolysis products W_p of lignite from the Bełchatów mine on temperature T [kg/kg]

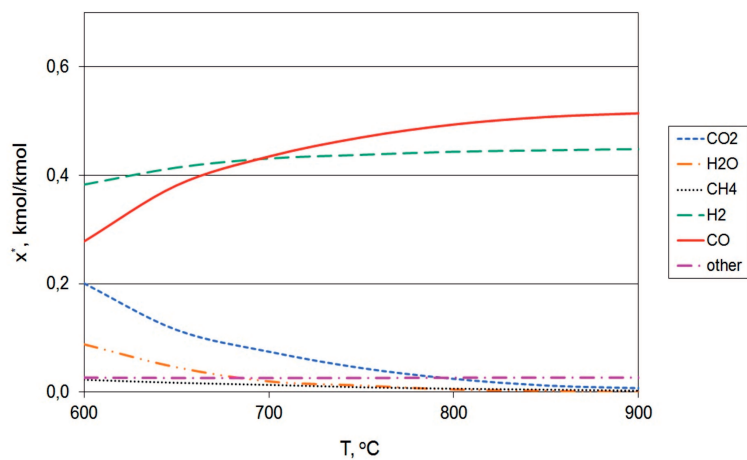
Podsumowanie

Wykorzystanie CO_2 do zgazowania węgla jest realną alternatywą dla jego podziemnego zatłaczania. Takie zgazowanie wydaje się być niezwykle atrakcyjne, gdyż jest to specyficzny sposób „chemicznej sekwestracji” dwutlenku węgla. Na podstawie przeprowadzonych obliczeń równowagowych można wyciągnąć następujące wnioski ogólne:



Rys. 3. Zależność składu gazu z pirolizy węgla brunatnego z kopalni Bełchatów x_g od temperatury T [kmol/kmol]

Fig. 3. Dependence of the pyrolysis gas composition x_g of lignite from Bełchatów mine on temperature T [kmol/kmol]



Rys. 4. Przykładowy skład równowagowy mieszaniny poreakcyjnej (wyrażony w ułamkach molowych x^*) otrzymanej po zgazowaniu węgla brunatnego z kopalni Bełchatów, kmol/kmol w zależności od temperatury T . Obliczenia wykonane dla stechiometrycznej mieszaniny czynników zgazowujących CO_2 i H_2O w stosunku 1:1

Fig. 4. Changes in the equilibrium composition x^* of the reaction mixture resulting from the gasification of Bełchatów coal with gasifying agents ratio $\text{CO}_2:\text{H}_2\text{O} = 1:1$

✧ proces zgazowania paliw kopalnych należy prowadzić w możliwie najwyższej temperaturze (zalecana temperatura powyżej 750°C); osiąga się wówczas duże stopnie przereagowania ditlenku węgla,

- ✧ zastosowanie ditlenku węgla jako czynnika zgazowującego pozwala na obniżenie zużycia węgla o około 17–30% (zależnie od temperatury procesu) przy stałej produkcji gazu syntezowego,
- ✧ wykorzystanie ciepła z reaktorów HTR pozwala na „zutilizowanie” około 0,2–0,4 kmol ditlenku węgla na 1 kmol zgazowywanego węgla pierwiastkowego zawartego w paliwie,
- ✧ opisana technologia umożliwia obniżenie bądź nawet całkowite wyeliminowanie zużycia tlenu, co zasadniczo obniża koszty zgazowania,
- ✧ w celu zwiększenia udziału wodoru w gazie syntezowym jako czynnik zgazowujący należy stosować mieszaninę ditlenku węgla i pary wodnej,
- ✧ zgazowanie paliw kopalnych za pomocą czystego ditlenku węgla przy wykorzystaniu ciepła HTR jest nieekonomiczne. Wynika to z silnego przesunięcia równowagi reakcji Boduarda ($C+CO_2$) w kierunku substratów w niskich temperaturach ($<800^\circ C$). Gaz poreakcyjny zawiera bardzo duże ilości nieprzereagowanego CO_2 .

Należy podkreślić, że praktyczne wdrożenie omawianej technologii, wykorzystującej CO_2 , jako czynnik zgazowujący, pozwoli w przyszłości na znaczące ograniczenie efektu cieplarnianego. Emisja CO_2 zostanie obniżona zarówno poprzez zmniejszenie zużycia węgla jako paliwa jak również poprzez chemiczne wiązanie już wytworzonego CO_2 w nowe produkty.

Praca została wykonana w ramach strategicznego projektu badawczego SP/J/1/166183/12 „Rozwój wysokotemperaturowych reaktorów do zastosowań przemysłowych”, finansowanego przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju.

Literatura

- STRUGAŁA i in. 2011 – STRUGAŁA A., CZAPLIKA-KOLARZ K., ŚCIAŻKO M. 2011 – Projekty nowych technologii zgazowania węgla powstające w ramach Programu Strategicznego NCBiR. *Polityka Energetyczna* t. 14, z. 2, s. 375–389.
- CHMIELNIAK i in. 2012 – CHMIELNIAK T., ŚCIAŻKO M., SOBOLEWSKI A., TOMASZEWICZ G., POPOWICZ J., 2012 – Zgazowanie węgla przy zastosowaniu CO_2 sposobem na poprawę wskaźników emisyjnych i efektywności procesu. *Polityka Energetyczna* t. 15, z. 4, s. 125–137.
- HAYAKAWA H. 2004 – Expectation of Japan’s industry for commercial HTR development. *Wyd. Nuclear Engineering and Design*, t. 233, z. 1–3, s. 391–400.
- HERRING i in. 2007 – HERRING J.S., O’BRIEN J.E., STOOT C.M., HAWKES G.L., HARTVIGSEN J.J., SHAHNA M., 2007 – Progress in high-temperature electrolysis for hydrogen production using planar SOFC technology. *International Journal of Hydrogen Energy* t. 32, z. 4, s. 440–450.
- KOLIANDR L. 1957 – Chwytnie i przeróbka chemicznych produktów koksowania. *Wyd. NOT, Warszawa* 1957.
- KUHR R., 2008 – HTR’s role in process heat applications. *Wyd. Nuclear Engineering and Design*, t. 238, z. 11, s. 3013–3017.
- ROBAK Z., 1998 – rozprawa doktorska: Otrzymywanie mezofazy węglowej w instalacji modelowej. *Pol. Śląska*.

- SAMUL i in. 2013 – SAMUL K., STRUPCZEWSKI A., WROCHNA G., 2013 – Małe Reaktory Modułowe SMR. Wydawnictwo Narodowe Centrum Badań Jądrowych.
- SZARAWARA J., 2005 – Termodynamika chemiczna stosowana. WNT, Warszawa.
- ŚCIAŻKO M., 2010 – Modele klasyfikacji węgla w ujęciu termodynamicznym i kinetycznym. Wyd. AGH, Kraków.
- VUJIĆA i in. 2012 – VUJIĆA J., BERGMANNA R.M., ŠKODAB R., MILETIĆ M., 2012 – Modular reactors: Simpler, safer, cheaper? Energy t. 45, z.1, s. 288–295.

Krzysztof JASTRZĄB, Olaf PIOTROWSKI

Analysis of the process heat utilization opportunities from the HTR reactors in the carbon dioxide gasification of fossil fuels

Abstract

Paper presents results of theoretical deliberations on the possibility to utilize energy deriving from high temperature nuclear reactors (HTR) to drive highly endothermic fossil fuels gasification by the assistance of carbon dioxide. Synthesis gas resulting in this process could be utilized for chemical syntheses e.g. to produce methanol or liquid synthetic fuels. At the same time practical implementation of such a process would make it possible to reduce carbon dioxide emissions to the atmosphere. This reduction would be realized in a twofold way: through a reduction of the amount of fuel burnt (bituminous coal) that is necessary to process execution as well as through utilization of carbon dioxide as a reaction substrate. Unfortunately the limit of such a solution has been relatively low temperature of the heating media coming out of the HTR reactors ($< 800^{\circ}\text{C}$), which negatively influences on the gasification process equilibrium. In order to evaluate the economic feasibility of the process in question, the methodology to calculate the equilibrium composition of the synthesis gas was developed. It was assumed that coal gasification process takes place in two consecutive stages. They are referred to as: quick pyrolysis of the fuel associated with production of the after pyrolysis gas and carbonizate and consecutive gasification of the resulted carbonizate by means of the gasifying mixture of gases (CO_2 , H_2O , O_2) and after pyrolytic gases. For such a system the chemical model was created that enables to calculate equilibrium composition of the after reaction gas mixture based on stoichiometric balance and on thermodynamic data. The methodology that was developed makes it possible to produce calculations for any species of coal with the application of mixture of carbon dioxide, steam, and oxygen at any proportions and excess in relation to the amount of the gasified coal. What is necessary is only knowledge of the basic physical and chemical characteristics of fuel and dependence of the after pyrolytic gases composition and pyrolysis intensity on temperature. In this paper the exemplary calculation results of the equilibrium composition in temperature range of $600\text{--}900^{\circ}\text{C}$ are presented. This corresponds to temperature of the heating medium from the nuclear

reactor HTR. Analysis of the influence of various factors (e.g. coal species, temperature, initial composition of the gasifying media) will enable the optimization of gasification process at an angle of oxygen consumption minimization and obtaining gases with high hydrogen concentration, or selection of coal with the best characteristics to low temperature gasification.

KEY WORDS: carbon dioxide, HTR, coal gasification, synthesis gas