



Simulation and Comparison of the Effect of Oxidizing Gas and Different Devolatilization Models in an Entrained-Flow Coal Gasifier

ARTICLE INFO

Article Type

Original Research

Authors

Yazdanpanah Jahromi M.A.¹ MSc,
Atashkari K.*¹ PhD,
Kalteh M.¹ PhD

How to cite this article

Yazdanpanah Jahromi M.A, Atashkari K, Kalteh M. Simulation and Comparison of the Effect of Oxidizing Gas and Different Devolatilization Models in an Entrained-Flow Coal Gasifier. Modares Mechanical Engineering, 2019;19(12):3071-3082.

¹Mechanical Engineering Faculty, University of Guilan, Rasht, Iran

*Correspondence

Address: Mechanical Engineering Faculty, University of Guilan, Rasht, Iran
Phone: -
Fax: -
atashkar@guilan.ac.ir

Article History

Received: October 20, 2018
Accepted: May 26, 2019
ePublished: December 21, 2019

ABSTRACT

Gasification technology is an important part of clean coal technology. Further development of this technology requires understanding the processes and interactions of gas and solid fuel particles injected into the gasifier. In this study, a numerical simulation of an entrained flow coal gasifier has been investigated using experimental operating conditions. The reactions and kinetic parameters of the gasification process have been extracted using coal gasification data obtained from similar published papers. Comparison of the simulation results with experimental data and two other similar studies confirm the accuracy of the developed model. The focus of this study is on the accuracy of the models presented for the devolatilization process and the effect of the oxidizer change from oxygen to air on the gasifier performance. Four devolatilization models including chemical percolation devolatilization, single rate, Kobayashi and constant rate models have been investigated. The predicted trends of species changes are similar in different devolatilization models but the amount of produced syngas is somewhat different depending on the accuracy of each model. The Kobayashi and constant rate models predict the devolatilization rate lower than the other two models. The results obtained from the chemical percolation devolatilization model are more consistent with the experimental data compared to the other models but require higher computational times. The use of air oxidizing agents reduces the concentration of produced syngas rather than oxygen and hence reduces the gasifier efficiency.

Keywords Gasification; Numerical Simulation; Coal Fuel; Devolatilization Process

CITATION LINKS

[1] IPCC guidelines for national greenhouse gas ... [2] Gasification database: active and planned commercial gasification ... [3] Numerical simulation of entrained flow coal gasifiers. Part I: modeling of coal gasification in an ... [4] Gasification CFD modeling for advanced power ... [5] Effects of fuel injection angles on performance of a two-stage coal ... [6] Effect of turbulence and devolatilization models on coal gasification simulation in ... [7] Gasification kinetics of a bituminous coal at elevated pressures: Entrained flow ... [8] Three-dimensional simulation for an entrained flow coal slurry ... [9] Particle formation during pressurized entrained flow ... [10] Numerical simulation and optimum operational point determination of a ... [11] Systems modeling, simulation and analysis for robust operations and improved ... [12] Numerical analysis on the influential factors of coal gasification performance in two- ... [13] Entrained-flow gasification at elevated ... [14] Measurement and prediction of entrained-flow ... [15] Effect of coal type on entrained ... [16] Numerical simulation of pulverized coal MILD combustion using a new heterogeneous ... [17] Numerical simulation of Opposed Multi-Burner gasifier under different coal ... [18] Water-gas shift modeling in coal gasification in an entrained-flow gasifier ... [19] The particle-source-in cell (PSI-CELL) model for gas-droplet ... [20] Pollutants generated by the combustion of solid biomass ... [21] Implementation of a demineralization and devolatilization model in multi-phase ... [22] Influence of coal type on devolatilization and combustion in ... [23] Prediction of light gas composition in coal ... [24] Simulation of Ash deposition behavior in an entrained flow coal ... [25] Chemical percolation model for ... [26] Coal devolatilization at high ... [27] Study on the fate of metal elements from biomass in a bench-scale ... [28] Influence of mineral matter on pyrolysis of palm oil ... [29] Numerical simulation of coal gasification in entrained flow coal ... [30] Kinetics and catalysis of the water-gas-shift reaction: a microkinetic and graph theoretic ... [31] Effects of turbulent mixing and controlling mechanisms in an entrained ... [32] 3-D CFD modeling for parametric study in a 300-MWe one-stage oxygen-blown entrained-bed ... [33] Numerical modeling of coal gasification in an entrained-flow ... [34] Computational fluid dynamics (cfD) modeling of a laboratory scale coal ...

شبیه‌سازی و مقایسه تاثیر گاز اکسیدکننده و مدل‌های مختلف فرآیند تبخیر مواد فرار در یک گازی‌ساز زغال‌سنگی نمونه ورود هم‌زمان

محمدعلی یزدان‌پناه جهرمی MSc

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت، ایران

کاتم آتشاری * PhD

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت، ایران

محمد کتله PhD

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت، ایران

چکیده

فناوری گازی‌سازی بخش مهمی از فناوری استفاده پاک از سوخت زغال‌سنگ به‌شمار می‌آید. توسعه هرچه بیشتر این فناوری نیازمند درک فرآیندها و اثرات متقابل جریان‌های گاز و ذرات سوخت جامد تزریق شده به درون محفظه گازی‌ساز است. در این مطالعه به شبیه‌سازی عددی یک گازی‌ساز زغال‌سنگی نمونه ورود هم‌زمان با استفاده از شرایط عملکردی آزمایشگاهی پرداخته شده است. واکنش‌ها و پارامترهای سینتیکی فرآیند گازی‌سازی با استفاده از داده‌های گازی‌سازی زغال‌سنگ در مقالات چاپ شده مشابه استخراج شده است. مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی و دو مطالعه مشابه دیگر به‌خوبی صحت مدل توسعه یافته را تایید می‌کند. تمرکز این مطالعه بر دقت مدل‌های ارائه شده برای فرآیند تبخیر مواد فرار از سوخت و بررسی تاثیر تغییر اکسیدکننده از اکسیژن به هوا بر عملکرد گازی‌ساز است. ۴ مدل تبخیر مواد فرار شامل مدل‌های نفوذ شیمیایی، تک‌نرخ، کوپایاشی و نرخ ثابت بررسی شده است. روند تغییرات پیش‌بینی شده برای گونه‌ها در مدل‌های مختلف مشابه یکدیگر است و بسته به دقت هر مدل مقدار سینگاز تولیدی تا حدودی با یکدیگر متفاوت است. مدل‌های کوپایاشی و نرخ ثابت، نرخ تبخیر مواد فرار آزاد شده از سوخت را نسبت به دو مدل دیگر کمتر پیش‌بینی می‌کنند. نتایج به دست آمده از مدل نفوذ شیمیایی نسبت به دیگر مدل‌ها مطابقت بیشتری با داده‌های آزمایشگاهی دارد اما زمان محاسباتی بالاتری طلب می‌کند. استفاده از اکسیدکننده هوا به‌جای اکسیژن سبب کاهش غلظت سینگاز تولیدی و بنابراین کاهش راندمان گازی‌ساز می‌شود.

کلیدواژه‌ها: گازی‌سازی، شبیه‌سازی عددی، سوخت زغال‌سنگ، فرآیند تبخیر مواد فرار

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۸/۲۸

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۳/۰۵

* نویسنده مسئول: atashkar@guilan.ac.ir

۱- مقدمه

به‌طورکلی احتراق سوخت به‌عنوان اصلی‌ترین منبع آلاینده‌گی محیط زیست شناخته می‌شود و معمولاً بیش از ۹۰٪ از آلاینده‌گی CO_2 و ۷۵٪ از کل گازهای گلخانه‌ای تولیدشده در کشورهای مختلف ناشی از فرآیند احتراق می‌باشد^[1]. روش‌های مختلفی در جهت کاهش انتشار آلاینده‌ها پیشنهاد و پیاده‌سازی شده است. استفاده از انرژی‌های تجدیدپذیر مانند نور خورشید، باد، زیست‌توده و غیره به‌طور گسترده‌ای در حال رشد و توسعه هستند. با این حال، هنوز نیز زغال‌سنگ به‌عنوان اصلی‌ترین منبع انرژی در سرتاسر جهان و منبعی غیرقابل انکار شناخته می‌شود.

گازی‌سازها تجهیزاتی مفید هستند که با هدف کاهش اثرات نامطلوب محیط زیستی در برابر محفظه‌های احتراق توسعه یافته‌اند. امروزه این تجهیزات در کشورهای مختلف به‌صورت وسیعی جهت تولید گرما و توان استفاده می‌شوند. طراحی گازی‌سازها و بهبود فرآیند گازی‌سازی بخش پیشرفته‌ای از فناوری را در کشورهای مختلف اشغال کرده است. برای کشور پهنواری مانند ایران با منابع مختلف انرژی، استفاده مؤثر و مفید از این فناوری از اهمیت بسزایی برخوردار است.

گازی‌سازی فرآیندی شیمیایی دمابالا است که در آن سوخت جامد پایه کربن با مقدار مشخص و محدودشده‌ای از گاز اکسیدکننده واکنش می‌دهد. در این فرآیند حد زیادی از سوخت هیدروکربنی تزریق‌شده به سوخت گازی تبدیل می‌شود. سوخت گازی تولیدشده که سینگاز (Syngas) نیز نامیده می‌شود می‌تواند خود به‌عنوان منبعی از انرژی یا به‌عنوان ماده اولیه جهت سنتز مواد شیمیایی، سوخت‌های مایع یا دیگر سوخت‌های گازی به‌کار برده شود. ترکیبات سینگاز تولیدشده عمدتاً شامل مونوکسیدکربن، هیدروژن و مقدار کمتری دی‌اکسیدکربن است و استفاده از آن به‌مراستب نسبت به سوخت جامد اولیه آسان‌تر است. استفاده از نیروگاه‌های سیکل ترکیبی شامل فرآیند گازی‌سازی (IGCC) روشی کارآمد جهت استفاده از سینگاز به‌منظور تولید توان می‌باشد.

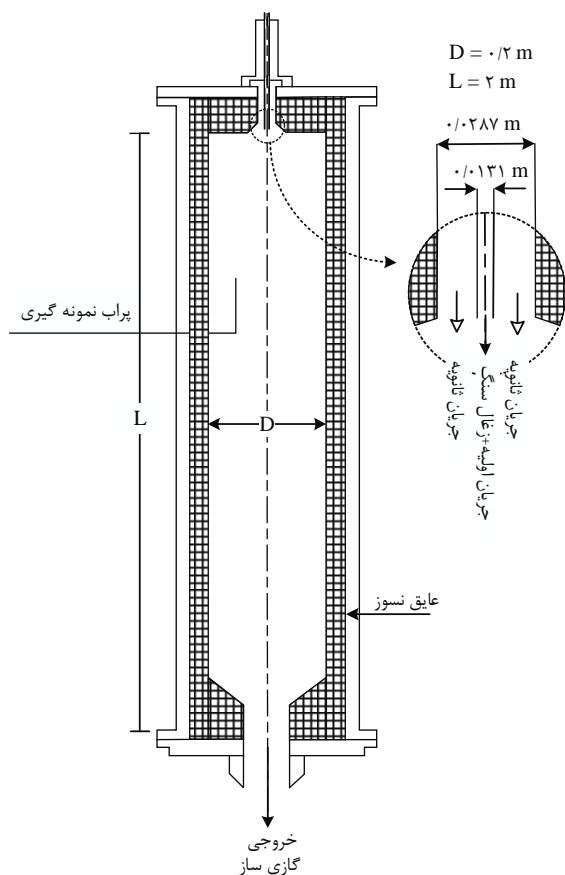
IGCC فناوری استفاده از گازی‌ساز جهت تبدیل زغال‌سنگ و نیز دیگر سوخت‌های بر پایه کربن به سینگاز می‌باشد. گازی‌ساز اصلی‌ترین تجهیز درون نیروگاه‌های IGCC است. طراحی مناسب این تجهیز یکی از اساسی‌ترین چالش‌ها در جوامع مهندسی درگیر با این موضوع است. بنابراین، لازم است میدان جریان درون گازی‌ساز به‌درستی فهمیده شود تا بتوان طراحی مطلوب و ارزیابی صحیحی از ویژگی آن داشت. فناوری گازی‌سازی می‌تواند برای هر نوع سوخت بر پایه کربن، مانند زغال‌سنگ، زیست‌توده، زباله‌های شهری و غیره استفاده شود. با این حال مشخصات شیمیایی-حرارتی سوخت مورد استفاده نقش بسزایی در طراحی و انتخاب سیستم گازی‌سازی و عملکرد آن بازی می‌کند. به‌منظور استفاده مؤثر و اقتصادی از منابع انرژی و درک فرآیند انجام‌شده درون محفظه گازی‌ساز، مدل‌های ریاضی متعددی جهت مدل‌سازی فرآیندهای گازی‌سازی توسعه داده شده‌اند. دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) به‌عنوان ابزاری قدرتمند به‌طور گسترده‌ای جهت دستیابی به این اهداف مورد استفاده قرار گرفته است. عمدتاً گازی‌سازها بر اساس چگونگی تماس گاز-جامد و نوع اکسیدکننده مورد استفاده به سه دسته گازی‌سازهای بستر سیال (Fluidized-Bed Gasifier)، گازی‌سازهای بستر ثابت/متحرک (Moving/Fixed-Bed Gasifier) و گازی‌سازهای نمونه ورود هم‌زمان (Entrained-Flow Gasifier) طبقه‌بندی می‌شوند. گازی‌سازهای نمونه ورود هم‌زمان به‌عنوان وسیع‌ترین و موفق‌ترین نوع گازی‌ساز مورد استفاده شناخته می‌شود. بر اساس بانک اطلاعاتی شرکت DOE/NETL بیش از ۸۵٪ نیروگاه‌های گازی‌سازی جهان از گازی‌ساز نمونه ورود هم‌زمان استفاده می‌کنند^[2]. در این مقاله نیز تمرکز اصلی روی مدل‌سازی و شبیه‌سازی این نمونه گازی‌ساز می‌باشد.

چین و همکاران^[3] به شبیه‌سازی گازی‌ساز نمونه ورود هم‌زمان با استفاده از سوخت زغال‌سنگ پرداخته‌اند. آن‌ها از مدل اوپلرین-لاگرانژین جهت این مطالعه استفاده کرده‌اند و نتایج خود را با داده‌های آزمایشگاهی مقایسه نموده‌اند. سازمان انرژی ایالات متحده آمریکا^[4] در آزمایشگاه فناوری ملی انرژی (NETL) به توسعه یک مدل CFD برای دو گازی‌ساز زغال‌سنگی تجاری‌سازی شده پرداخته است. آن‌ها از نرم‌افزار فلوئنت و مدل اوپلرین-لاگرانژین جهت شبیه‌سازی گازی‌ساز اول که با استفاده از سوخت زغال‌سنگ دوغابی (Slurry-Fed Coal) تغذیه می‌شود، استفاده کرده‌اند. گازی‌ساز مطالعه‌شده دوم توسط آن‌ها، با استفاده از مدل اوپلرین- اوپلرین و با استفاده از نرم‌افزار توسعه داده شده توسط آن شرکت به نام MFIX مطالعه شده است. سیلان و وانگ^[5] مجموعه‌ای از مطالعات عددی را روی گازی‌ساز زغال‌سنگی نمونه

برای هر مدل به صورت مجزا پیاده‌سازی شده و نتایج به دست آمده با یکدیگر مقایسه شده‌اند. همچنین، تغییر اکسیدکننده از اکسیژن به هوا مورد مطالعه قرار گرفته و راندمان گازی‌ساز در دو حالت مقایسه شده است.

۲- هندسه گازی‌ساز

گازی‌ساز BYU که در دانشگاه بریگهام یانگ ساخته شده است، یک نمونه آزمایشگاهی و از نوع گازی‌ساز ورود هم‌زمان تک‌مرحله‌ای است که سوخت و اکسیدکننده از بالای محفظه به درون گازی‌ساز تزریق می‌شوند. آزمایش‌های احتراق و گازی‌سازی متعددی با استفاده از سوخت زغال‌سنگ روی این گازی‌ساز انجام گرفته است [13]. سوخت زغال‌سنگ به صورت پودر شده همراه با اکسیژن به عنوان اکسیدکننده از طریق یک ورودی مرکزی به عنوان ورودی اولیه و بخار آب از طریق رینگ بیرونی به عنوان ورودی ثانویه به صورت هم‌زمان به درون گازی‌ساز تزریق می‌شوند. اطلاعات تجربی استفاده شده در این مطالعه بر اساس اطلاعات داده شده در نمونه آزمایشگاهی می‌باشد. شماتیک این گازی‌ساز در شکل ۱ نشان داده شده است. قطر داخلی گازی‌ساز ۰/۲m و طول آن ۲m می‌باشد و در فشار اتمسفریک کار می‌کند. جریان درون این گازی‌ساز غیر چرخشی (Non-Swirling Flow) است. مشخصات زغال‌سنگ استفاده شده در مطالعه حاضر، منطبق با مشخصات زغال‌سنگ مورد استفاده در نمونه آزمایشگاهی در نظر گرفته شده است تا امکان مقایسه نتایج حاصل از شبه‌سازی با نتایج آزمایشگاهی میسر باشد. این زغال‌سنگ با نام تجاری یوتا بیتومنس (Utah Bituminous) شناخته می‌شود و مشخصات آنالیز تقریبی، نهایی و ارزش حرارتی آن در جدول ۱ آورده شده است.



شکل ۱) هندسه شماتیک گازی‌ساز آزمایشگاهی BYU [15]

ورود هم‌زمان دومرحله‌ای با استفاده نرم افزار فلونت انجام داده‌اند. آن‌ها تاثیر پارامترهای مختلفی مانند شرایط زغال‌سنگ تزریق شده (نمونه خشک یا دوغابی)، گاز اکسیدکننده (اکسیژن یا هوا)، خنک‌کاری دیواره و توزیع متفاوت سوخت بین دو سطح اترکتور موجود بر گازی‌ساز را بررسی نموده‌اند. نتایج به دست آمده توسط آن‌ها بررسی چگونگی توزیع دما و گونه‌های گازی درون محفظه گازی‌ساز می‌باشد. در ادامه آن‌ها به بررسی تاثیر زوایای تزریق سوخت از نازل‌های قرار گرفته روی همان نوع گازی‌ساز پرداخته‌اند [5] و تاثیر پارامترهای مختلف بر عملکرد گازی‌ساز را مورد مطالعه قرار داده‌اند [6]. این مطالعه شامل بررسی مدل‌های توربولانسی و نیز مدل‌های تبخیر مواد فرار مختلف می‌باشد.

ستیبیل و همکاران [7] رفتار فرآیند گازی‌سازی را در فشارهای بالا برای یک گازی‌ساز ورود هم‌زمان زغال‌سنگی مورد بررسی قرار داده‌اند. آن‌ها از داده‌های آزمایشگاهی در شبه‌سازی خود استفاده کرده‌اند و نتایج خود را با نتایج آزمایشگاهی مقایسه کرده‌اند. آن‌ها نتیجه گرفته‌اند که افزایش فشار کلی محفظه گازی‌ساز منجر به کاهش میزان تبخیر مواد فرار از سوخت زغال‌سنگ می‌شود. وو و همکاران [8] به بررسی تاثیر اندازه ذرات زغال‌سنگ و میزان غلظت دوغاب زغال‌سنگ بر میزان کربن تبدیل شده به سوخت گازی (CCE) در یک گازی‌ساز ورود هم‌زمان پرداخته‌اند.

وینیکا و همکاران [9] تاثیر پارامترهای عملکردی مختلف مانند نسبت هم‌ارزی و توزیع ذرات سوخت زیست‌توده چوب در یک گازی‌ساز ورود هم‌زمان را مورد بررسی قرار داده‌اند و مقدار بهینه را جهت پیاده‌سازی فرآیند مشخص کرده‌اند. بهاری و همکاران [10] به بررسی تاثیر تغییر نسبت هم‌ارزی بر راندمان گازی‌ساز و میزان آلاینده تولید شده برای یک گازی‌ساز رو به پایین پرداخته‌اند.

کائو و همکاران [11] به مدل‌سازی و شبه‌سازی عددی یک نمونه گازی‌ساز زغال‌سنگی ورود هم‌زمان ساخت شرکت شل (Shell) پرداخته‌اند. آن‌ها تاثیر زوایای تزریق سوخت بر الگوی جریان درون محفظه را مورد مطالعه قرار داده و زاویه بهینه را جهت رسیدن به حداکثر راندمان خروجی به دست آورده‌اند. وانگ و همکاران [12] به شبه‌سازی عددی یک گازی‌ساز زغال‌سنگی دومرحله‌ای ورود هم‌زمان به صورت دوبعدی پرداخته‌اند. در مطالعه انجام شده توسط آن‌ها نسبت توزیع اکسیدکننده به سوخت بین دو مرحله گازی‌ساز بر عملکرد آن مورد مطالعه قرار گرفته است.

در این مطالعه به شبه‌سازی عددی یک گازی‌ساز نمونه ورود هم‌زمان با استفاده از سوخت زغال‌سنگ پرداخته شده است. گازی‌سازی مورد مطالعه نمونه آزمایشگاهی و مربوط به دانشگاه بریگهام یانگ است که با نام گازی‌ساز (Brigham Young University) معرفی شده است. پارامترهای هندسی و شرایط عملکردی گازی‌ساز با استفاده از مقالات موجود استخراج شده است. واکنش‌های گازی‌سازی و پارامترهای سینتیکی فرآیند انجام شده در محفظه گازی‌ساز با استفاده از اطلاعات موجود در مقالات مشابه به دست آمده است. پس از انجام شبه‌سازی جهت اطمینان از اعتبار نتایج به دست آمده، نتایج با داده‌های آزمایشگاهی موجود مقایسه شده است و از عدم حساسیت نتایج به شبکه‌بندی اطمینان حاصل شده است. جهت بررسی بیشتر، نتایج با دو مطالعه مشابه دیگر نیز مقایسه شده است. نتایج به دست آمده مطابقت مناسبی با نتایج داده‌های آزمایشگاهی و مطالعات مشابه دیگر تأیید می‌کند. در ادامه چهار مدل معمول فرآیند تبخیر مواد فرار از ذرات سوخت بررسی و مقایسه شده‌اند. این مدل‌ها شامل مدل نفوذ شیمیایی، مدل تک‌نرخ، مدل کوبایاشی و مدل نرخ ثابت می‌باشند. شبه‌سازی

مشخصات سوخت زغال سنگ	
آنالیز تقریبی (wt %)	
کربن ثابت	۴۳/۷
رطوبت	۲/۴
خاکستر	۸/۳
مواد فرار	۴۵/۶
آنالیز نهایی (wt %)	
کربن	۷۱/۰
اکسیژن	۱۲/۷
هیدروژن	۶/۰
نیتروژن	۱/۳
گوگرد	۰/۵
ارزش حرارتی بر مبنای سوخت خشک (J kg^{-1})	۲۹/۸
شرایط عملکردی آزمایش	
کسر مولی گونه‌ها	
$x_{O_2} = 0.185$	
$x_{Ar} = 0.126$	۰/۰۰۷۲۹
$x_{H_2O} = 0.242$	
$x_{H_2O} = 1$	۰/۰۰۱۸۴
	۰/۹۱۰
دبی جریان اولیه ورودی (kg. s^{-1})	۰/۰۰۷۲۹
دبی جریان ثانویه ورودی (kg. s^{-1})	۰/۰۰۱۸۴
میزان بارگذاری ذرات	
توزیع اندازه ذرات	
	μm
	۳
	۲۰
	۲۸
	۵۰
	۸۰
	%۲۰

۳- توصیف مدل

در گازی‌ساز ورود هم‌زمان BYU فرآیندهای فیزیکی و شیمیایی چند فازی مختلفی انجام می‌شود. این فرآیندها شامل جریان دوفازی گاز- ذره، تبخیر رطوبت موجود در سوخت تریقی شده، تبخیر مواد فرار موجود در سوخت، واکنش‌های همگن بین گونه‌های گازی، واکنش‌های ناهمگن بین ذرات سوخت جامد و فاز گازی و فرآیندهای انتقال جرم و انتقال حرارت می‌گردد. از این‌رو مدلی می‌تواند عملکرد گازی‌ساز را به درستی پیش‌بینی کند که همه فرآیندهای انجام‌شده را در نظر گرفته باشد.

در ادامه جزئیات زیرمدل‌های مختلف بررسی شده در این مطالعه بررسی شده است. به‌طور معمول، در گازی‌سازهای نمونه ورود هم‌زمان دمای عملکردی بالا است. از این‌رو، مقدار تار (Tar) تولیدشده ناچیز می‌باشد و انتظار می‌رود تأثیر چندانی بر عملکرد گازی‌ساز نداشته باشد. در این مطالعه از فرآیند تشکیل تار صرف‌نظر شده است.

۳-۱- فرضیات و معادلات حاکم بر مسئله

جهت پیش‌بینی هرچه دقیق‌تر جریان سیال درون محفظه گازی‌ساز و نیز مشخصات گونه‌های تولیدشده ناشی از فرآیند گازی‌سازی پارامترهای مختلفی باید مد نظر قرار گیرند. از این‌رو نیاز است زیرمدل‌های مختلفی شامل توربولانسی، تشعشع، انتقال حرارت، واکنش‌های همگن و ناهمگن گازی‌سازی و احتراق در نظر گرفته شوند. معادلات حاکم و ثابت‌های مدل توربولانسی استفاده‌شده در جدول ۲ آورده شده است.

جدول ۲) معادلات پیوستگی حاکم بر مسئله

فاز پیوسته						
$\nabla \cdot (\rho_g u_g) = S_{p,m}$	(۱) بقای جرم					
$\nabla \cdot (\rho_g u_g u_g) = -\nabla p + \nabla \cdot (\tau_{eff}) + \rho_g g + S_{p,mom}$	(۲- الف) بقای مومنتوم					
$\tau_{eff} = -\frac{2}{3} \mu_{eff} (\nabla \cdot u_g) I + \mu_{eff} ((\nabla u_g)) + (\nabla u_g)^T$	(۲- ب)					
$\nabla \cdot (u_g (\rho_g E + p)) = \nabla \cdot \alpha_{eff} \nabla h_s + S_h + S_{p,h} + S_{rad}$	(۳- الف) بقای انرژی					
$E = h_s - \frac{p}{\rho_g} + \frac{u_g^2}{2}$	(۳- ب)					
$\alpha_{eff} = \alpha_g + \frac{\mu_t}{Pr_t}$	(۳- پ)					
$\nabla \cdot (\rho_g u_g Y_i) = \nabla \cdot \rho_g D_{i,eff} + S_{p,Y_i} + S_{Y_i}$	(۴- الف) انتقال گونه					
$D_{i,eff} = D_g + \frac{\mu_t}{\rho_g Sc_t}$	(۴- ب)					
فاز گسسته						
$\frac{dm_p}{dt} = \left(\frac{dm_p}{dt}\right)_{drying} + \left(\frac{dm_p}{dt}\right)_{devolatilization} + \left(\frac{dm_p}{dt}\right)_{reaction}$	(۵) بقای جرم					
$\frac{dv_p}{dt} = f_{D,p} + g(1 - \frac{\rho_g}{\rho_p})$	(۶- الف)					
$f_{D,p} = \frac{3\mu_g C_D Re_p}{4\rho_p d_p^2} (u_g - v_p)$	(۶- ب)					
$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + \frac{1}{6} Re_p^{\frac{2}{3}}) & Re_p \leq 1000 \\ 0.424 & Re_p > 1000 \end{cases}$	(۶- پ)					
$Re_p = \frac{\rho_g d_p u_g - v_p }{\mu_g}$	(۶- ت)					
$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h_p A_p (T_g - T_p) + \frac{\epsilon_p A_p}{4} (G - 4\sigma T_p^4) + Q_G$	(۷- الف) بقای انرژی					
$Nu = \frac{h_p d_p}{k_g} = 2 + 0.6 Re_p Pr^{-1/3}$	(۷- ب)					
$Q_G = \frac{dm_{C-O_2}}{dt} H_{C-O_2} + \frac{dm_{C-CO_2}}{dt} H_{C-CO_2} + \frac{dm_{C-H_2O}}{dt} H_{C-H_2O} + \frac{dm_{C-H_2}}{dt} H_{C-H_2}$	(۷- پ)					
مدل توربولانسی						
$\mu_t = \rho C_\mu k^2 / \epsilon$	(۸)					
$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + G_k - \rho \epsilon$	(۹)					
$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i \epsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right] + C_{1\epsilon} G_k \frac{\epsilon}{k} - C_{2\epsilon} G_k \rho \frac{\epsilon^2}{k}$	(۱۰)					
$\rho u_i Y_j^T = -\rho D \frac{\partial Y_j^T}{\partial x_i} - \frac{\mu_t}{Sc_r} \frac{\partial Y_j^T}{\partial x_i}$	(۱۱)					
$\rho C_p u_i T^T = -\lambda \frac{\partial T^T}{\partial x_i} - C_p \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T^T}{\partial x_i}$	(۱۲)					
ثابت‌های معادله توربولانسی						
Sc_t	Pr_t	σ_ϵ	σ_k	$C_{2\epsilon}$	$C_{1\epsilon}$	C_μ
۰/۷۰	۰/۸۵	۱/۳۰	۱/۰۰	۱/۹۲	۱/۴۴	۰/۰۹

تزیق شده بستگی دارد [20]. در این مدل نرخ سینتیک واکنش توسط رابطه آرنیوس طبق معادله (۱۴) معین می‌گردد.

$$k = Ae^{-\frac{E}{RT}} \quad (14)$$

که A عامل پیش‌نمایی و E انرژی فعال‌سازی واکنش می‌باشند که در این مطالعه به ترتیب برابر با $4/92 \times 10^5$ و $7/4 \times 10^7 \text{ J.kgmol}^{-1}$ در نظر گرفته شده است [21].

(ب) مدل نرخ ثابت

در این مدل فرض شده است که مواد فرار موجود در سوخت با نرخ ثابتی آزاد می‌شوند. در کارهای انجام شده توسط خان و وانگ [21] و نیز پیلا [22] این نرخ برابر 125^{-1} در نظر گرفته شده است.

(ج) مدل نفوذ شیمیایی (CPD)

مدل نفوذ شیمیایی (CPD) تغییر شیمیایی ساختار ذرات زغال‌سنگ را حین فرآیند تبخیر مواد فرار در نظر می‌گیرد. این تغییر به صورت یک تغییر در پیوندهای شیمیایی زغال‌سنگ مدل‌سازی می‌شود که به‌طور کلی منجر به آزاد شدن گازهای سبک، چار (Char) و تار می‌گردد. این مدل به دلیل حجم محاسبات بالاتری که نسبت به دیگر مدل‌ها انجام می‌دهد دارای هزینه محاسباتی بالاتری می‌باشد. جزئیات مدل CPD در مرجع [23] به صورت کامل بررسی شده است. در این مطالعه، کسر اولیه پیوندها در شبکه زغال‌سنگ برابر با یک و کسر اولیه چار برابر با صفر در نظر گرفته شده است. همچنین، وزن مولکولی خوشه‌ای برابر با ۴۰۰ و وزن مولکولی زنجیره جانبی برابر با ۵۰ در نظر گرفته شده است [24, 25].

(د) مدل کوبایاشی (Kobayashi)

یکی دیگر از روش‌های تخمین میزان مواد فرار آزاد شده از ذرات سوخت، استفاده از مدل کوبایاشی است که اولین بار توسط کوبایاشی و همکاران [26] معرفی گردید. به کمک این مدل، می‌توان نرخ تبخیر مواد فرار در دماهای بالا و پایین را با زمان محاسباتی قابل قبولی محاسبه نمود. این مدل به صورت گسترده‌ای در مقالات مختلف مورد استفاده قرار گرفته است. نرخ تبخیر مواد فرار در این مدل توسط رابطه (۱۵) محاسبه می‌شود.

$$\frac{m_v(t)}{(1-f_{w,0})m_{p,0}-m_a} = \int_0^t (\alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2) \exp\left(-\int_0^t (k_1 + k_2) dt\right) dt \quad (15)$$

که در این رابطه $m_v(t)$ جرم کلی مواد فرار (kg) باقیمانده در ذرات سوخت در زمان t می‌باشد؛ $m_{p,0}$ جرم اولیه ذره سوخت (kg)، m_a جرم محتوای خاکستر (kg)، $f_{w,0}$ کسر جرمی رطوبت، α_1 و α_2 پارامترهای عملکردی و k_1 و k_2 توسط روابط زیر به دست می‌آیند:

$$k_1 = A_1 e^{-\frac{E_1}{RTp}} \quad (16)$$

و

$$k_2 = A_2 e^{-\frac{E_2}{RTp}} \quad (17)$$

که A_1 و A_2 پارامترهای تبخیر مواد فرار و E_1 و E_2 انرژی فعال‌سازی واکنش‌ها (J.kgmol^{-1}) می‌باشند. مقادیر در نظر گرفته شده در این مطالعه برای پارامترهای فوق در جدول ۳ آورده شده است.

جدول ۳ پارامترهای مدل تبخیر مواد فرار [11]

پارامتر	مقدار	پارامتر	مقدار
A_1 (s^{-1})	2×10^5	A_2 (s^{-1})	$1/3 \times 10^7$
E_1 (J.kgmol^{-1})	$1/046 \times 10^4$	E_2 (J.kgmol^{-1})	$1/67 \times 10^4$
α_1	۰/۳	α_2	۱

پس از اینکه همه مواد فرار از ذرات زغال‌سنگ تبخیر شدند، سوخت

فرم کلی معادلات حاکم به صورت روابط (۱) تا (۱۲) می‌باشد. این زیرمدل‌ها به صورت خلاصه در ادامه بررسی شده‌اند. جهت ساده‌سازی فرآیند پیچیده انجام شده درون محفظه گازی‌ساز فرضیات زیر در نظر گرفته شده‌اند:

- جریان پایا، غیرقابل تراکم و آشفته در نظر گرفته شده است.
- از گونه‌های آلاینده هوا مانند HCN ، NH_3 ، CS_2 و COS صرف‌نظر شده است.

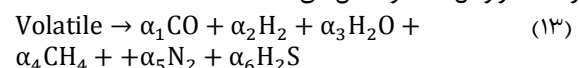
- به دلیل تقارن هندسی، هندسه گازی‌ساز به صورت دوعبده و متقارن محوری در نظر گرفته شده است.

به منظور شبه‌سازی جریان توربولانسی فاز گازی درون محفظه گازی‌ساز، معادلات ناویر-استوکس متوسط زمانی حالت پایدار و نیز معادلات بقای انرژی و انتقال گونه‌ها حل شده‌اند. در این مطالعه، از مدل توربولانسی $k - \epsilon$ استاندارد و مدل تابشی (Discrete DO Ordinate) جهت محاسبه انتقال حرارت تشعشعی درون گازی‌ساز استفاده شده است. به طور معمول در شبه‌سازی‌های عددی دو رویکرد معمول جهت حل جریان‌های چندفازی استفاده می‌شود: رویکرد اوپلرین- اوپلرین و دیگری اوپلرین- لاگرانژی. در رویکرد اوپلرین- اوپلرین فاز جامد مانند فاز شبه سیال در نظر گرفته می‌شود و هر دو فاز به صورت فاز پیوسته در نظر گرفته می‌شوند. در رویکرد اوپلرین- لاگرانژی، فاز گازی به صورت فاز پیوسته و ذرات جامد سوخت به صورت فاز گسسته در نظر گرفته می‌شوند. فاز گسسته می‌تواند با فاز پیوسته تبادل جرم، مومنتوم و انرژی داشته باشد. باید توجه داشت که فرض اساسی در استفاده از رویکرد اوپلرین- لاگرانژی این است که ذرات فاز گسسته کسر حجمی کوچکی از فضای دامنه حل را اشغال می‌کنند که معمولاً کمتر از ۱۰٪ می‌باشد. به طور معمول در اغلب مطالعات انجام شده [16-18] از رویکرد اوپلرین- لاگرانژی جهت شبه‌سازی فرآیند گازی‌سازی استفاده شده است.

در این مطالعه نیز از رویکرد اوپلرین- لاگرانژی جهت حل جریان گاز- ذره و از مدل گام تصادفی (Random Walk) جهت توصیف حرکت ذرات در مختصات لاگرانژی استفاده شده است. تعاملات بین فازهای گاز و ذرات سوخت جامد با استفاده از دیدگاه چشمه ذرات درون سلول (PSI-Cell) و به منظور ارزیابی ترم‌های چشمه استفاده شده است [19]. در این دیدگاه فاز ذره از طریق جملات چشمه تبادل بین فازی $S_{p,m}$ ، $S_{p,mom}$ ، S_h و S_{γ_i} (معادلات (۱) تا (۴)) با فاز گازی هم‌بسته‌سازی می‌شود.

۲-۳- واکنش‌های شیمیایی

پس از تبخیر رطوبت موجود در سوخت زغال‌سنگ تزیق شده، فرآیند تبخیر مواد فرار اتفاق می‌افتد. مواد فرار به صورت یک گونه واحد به صورت $C_m H_n O_x N_y S_z$ در نظر گرفته شده است. گونه‌های CO ، H_2 ، H_2O ، CH_4 ، N_2 و H_2S از اصلی‌ترین گونه‌های فرار حین فرآیند گازی‌سازی می‌باشند. واکنش (۱۳) تبخیر گونه‌های فرار آزاد شده از زغال‌سنگ را نشان می‌دهد:



مدل‌های تبخیر مواد فرار مختلفی با رویکردهای متفاوت توسط محققان پیشنهاد شده است. هرکدام از این مدل‌ها با توجه به سرعت و دقت محاسباتی که دارند در مسائل مختلف مورد استفاده قرار گرفته‌اند. در ادامه به اختصار چهار مدل مختلف تبخیر مواد فرار را که بیشترین کاربرد در مسائل مرتبط با احتراق و گازی‌سازی دارند و در این مطالعه استفاده شده است مورد بررسی قرار گرفته است:

(الف) مدل تک‌نرخی

نرخ تبخیر مواد فرار به مقدار مواد فرار موجود در ذرات سوخت

توزیع شده، تبخیر مواد فرار و انجام واکنش‌های همگن و ناهمگن درون محفظه می‌باشد. این مراحل به صورت متوالی درون محفظه انجام می‌شود. در ابتدا سوخت به صورت پودر شده به درون محفظه تزریق می‌شود. رطوبت موجود در ذرات سوخت در اثر حرارت تبخیر می‌شود. پس از آن سوخت خشک شده مجدداً تحت حرارت قرار گرفته و فرآیند تبخیر مواد فرار انجام می‌پذیرد. سوخت جامد باقیمانده با نام چار (Char) شناخته می‌شود و فرض شده است که تنها شامل کربن جامد و برخی مواد معدنی باشد.

۵- شبیه‌سازی عددی و صحت‌سنجی مدل

در این مطالعه چهار حالت مختلف مورد مطالعه قرار گرفته است:
 - حالت اول (Case 1): حالت مینا، استفاده از مدل نفوذ شیمیایی
 - حالت دوم (Case 2): استفاده از مدل تک‌نرخی
 - حالت سوم (Case 3): استفاده از مدل کوبیاشی
 - حالت چهارم (Case 4): استفاده از مدل نرخ ثابت
 - حالت پنجم (Case 5): استفاده از هوا به عنوان اکسیدکننده بجای اکسیژن

۵-۱- حالت اول (حالت مینا)

به منظور افزایش دقت و اطمینان از صحت نتایج به دست آمده، نیاز است عدم وابستگی نتایج به شبکه‌بندی هندسه مورد مطالعه قرار گیرد. از شبکه‌بندی ساختاریافته جهت مش‌بندی هندسه استفاده شده است. برای این منظور سه سطح مختلف از مش‌بندی با تعداد کل سلول‌های ۲۲۰۰۰ (Mesh-1)، ۴۵۰۰۰ (Mesh-2) و ۸۰۰۰۰ (Mesh-3) انتخاب شده و شبیه‌سازی به صورت مجزا برای هر شبکه‌بندی انجام شده است. این بررسی در نمودار ۱ نشان داده شده است. با مقایسه نتایج به دست آمده از سه حالت برای پروفیل‌های دما (نمودار ۱- الف) و سرعت (نمودار ۱- ب) در مرکز گازی‌ساز مشاهده شده است که نتایج پس از افزایش تعداد شبکه‌بندی به بیش از ۴۵۰۰۰ تغییرات ناچیزی دارند. بنابراین شبکه‌بندی با نام Mesh-2 جهت ادامه شبیه‌سازی انتخاب شده است. در شکل ۲ نمایی از شبکه‌بندی هندسه گازی‌ساز در حالت Mesh-2 نشان داده شده است.

به منظور اطمینان از صحت نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی CFD، شرایط عملکردی گازی‌ساز مطابق با شرایط آزمایشگاهی در نظر گرفته شده است. گونه‌های غالب به دست آمده از فرآیند گازی‌سازی و نیز دمای سینگاز تولید شده در راستای محور گازی‌ساز محاسبه شده و با داده‌های آزمایشگاهی [15] و کارهای مشابه [33, 34] مقایسه شده است. این نتایج در نمودار ۲ نشان داده شده است. اگرچه در این مقالات روند تغییرات گونه‌ها در راستای محور گازی‌ساز بررسی شده است، اما مقادیر پیش‌بینی شده برای گونه‌ها در برخی نواحی با مقادیر آزمایشگاهی تفاوت قابل ملاحظه‌ای دارند.

در مطالعه انجام شده در این مقاله، غلظت مولی گونه‌های مختلف در راستای محور گازی‌ساز بررسی و مقایسه شده است و به عنوان پارامترهای شاخص جهت اعتبار و صحت‌سنجی مدل CFD توسعه یافته استفاده شده است. نتایج به دست آمده دقت شبیه‌سازی انجام شده و مطابقت مناسب آن‌ها را با داده‌های آزمایشگاهی نشان می‌دهد. به منظور اطمینان از صحت نتایج به دست آمده در دیگر نواحی، کانتور گونه‌های گازی به دست آمده از فرآیند گازی‌سازی و نیز سرعت و دما برای گازی‌ساز بررسی گردیده است که نتایج در نمودار ۳ آورده شده است. اگرچه ممکن است مدل ارائه شده نتواند همه نوسانات و داده‌های آزمایشگاهی موجود را پیش‌بینی کند، اما کسر مولی گونه‌ها در اکثر نواحی به خصوص در خروجی گازی‌ساز و نیز

باقیمانده با گونه‌های گازی از طریق واکنش‌های ناهمگن احتراق و گازی‌سازی واکنش می‌دهد. خاکستر در این فرآیندها شرکت نمی‌کند [27, 28]. فرآیند گازی‌سازی انجام شده درون محفظه گازی‌ساز توسط واکنش‌های ذکر شده در جداول ۴ و ۵ می‌تواند توصیف شود.

جدول ۴) نرخ‌های سینتیکی واکنش‌های ناهمگن گازی‌سازی زغال‌سنگ [3]

واکنش	آنتالپی واکنش (MJ kmol ⁻¹)	ضریب پیش‌دما	انرژی فعال‌سازی (J kmol ⁻¹)
$C + H_2O \xrightarrow{k_1} CO + H_2$	+۱۳۱	۰/۰۷۸۲	۱/۱۵×۱۰ ^۴
$C + 0.5O_2 \xrightarrow{k_2} CO$	-۱۱۱	۰/۰۵۲	۶/۱×۱۰ ^۷
$C + CO_2 \xrightarrow{k_3} 2CO$	+۱۷۲	۰/۰۷۳۲	۱/۱۲۵×۱۰ ^۴

جدول ۵) نرخ‌های سینتیکی واکنش‌های همگن گازی‌سازی زغال‌سنگ

واکنش	آنتالپی واکنش (MJ kmol ⁻¹)	ضریب پیش‌دما	انرژی فعال‌سازی (J kmol ⁻¹)	مرجع
$H_2 + 0.5O_2 \xrightarrow{k_4} H_2O$	-۲۴۲	۶/۸×۱۰ ^{۱۳}	۱/۶۸×۱۰ ^۴	[29]
$CO + 0.5O_2 \xrightarrow{k_5} CO_2$	-۲۸۳	۲/۲×۱۰ ^{۱۲}	۱/۶۷×۱۰ ^۴	[29]
$CO + H_2O \xrightarrow{k_6} CO_2 + H_2$	-۴۱/۱	۵×۱۰ ^{۱۲}	۲/۸۳×۱۰ ^۴	[30]
$CO_2 + H_2 \xrightarrow{k_7} CO + H_2O$	+۴۱/۱	۹/۵×۱۰ ^{۱۲}	۲/۳۹×۱۰ ^۴	[30]
$CH_4 + 0.5O_2 \xrightarrow{k_8} 2H_2 + CO$	-۳۵/۷	۴/۴×۱۰ ^{۱۲}	۱/۲۵×۱۰ ^۴	[31]
$CH_4 + H_2O \xrightarrow{k_9} 3H_2 + CO$	+۲۰۶	۸/۷×۱۰ ^{۱۲}	۲/۵۱×۱۰ ^۴	[32]

در واکنش‌های فوق، A_7 ضریب پیش‌دما و E_7 انرژی فعال‌سازی واکنش می‌باشد.

۳-۳- شرایط مرزی

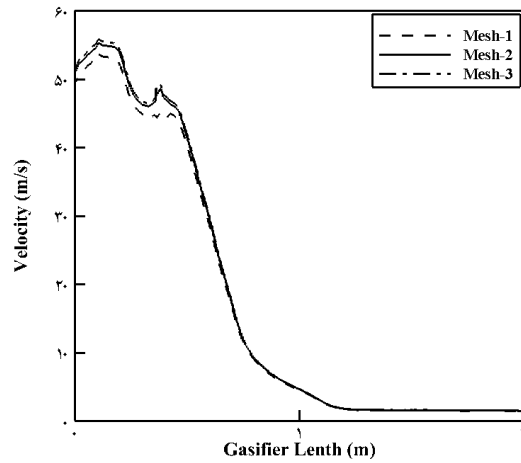
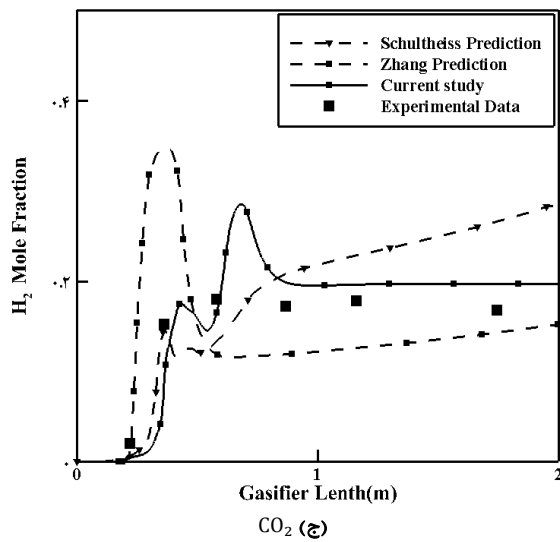
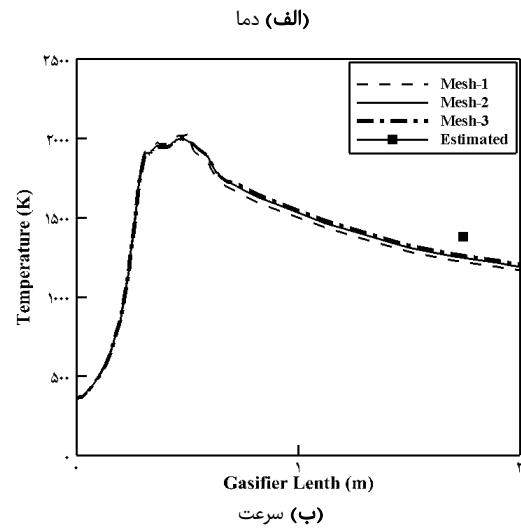
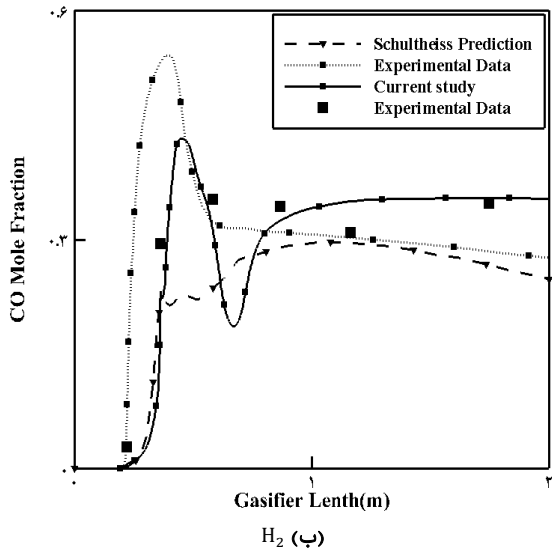
سوخت زغال‌سنگ به صورت پودر در دمای ۳۶۷K به درون محفظه گازی‌ساز تغذیه می‌شود. از هوا به عنوان گاز حامل جهت انتقال ذرات سوخت به درون محفظه استفاده شده است. دمای هوای ورودی ۴۵۰K در نظر گرفته شده است. دبی جرمی جریان ذرات زغال‌سنگ تزریق شده از ورودی اولیه گازی‌ساز ۰/۰۰۶۶۳ می‌باشد و دیگر شرایط عملکردی گازی‌ساز در جدول ۱ ذکر شده است. داده‌های استفاده شده در این مطالعه بر اساس اطلاعات داده شده در نمونه آزمایشگاهی [14] می‌باشد تا امکان مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج آزمایشگاهی میسر باشد. ذرات زغال‌سنگ تزریق شده دارای قطر متوسط ۳۶μm می‌باشند که چگونگی توزیع آن‌ها در جدول ۱ آورده شده است.

خط مرکزی گازی‌ساز به عنوان خط تقارن محوری (Axisymmetric Line) و شرط عدم لغزش برای دیواره‌های گازی‌ساز در نظر گرفته شده است.

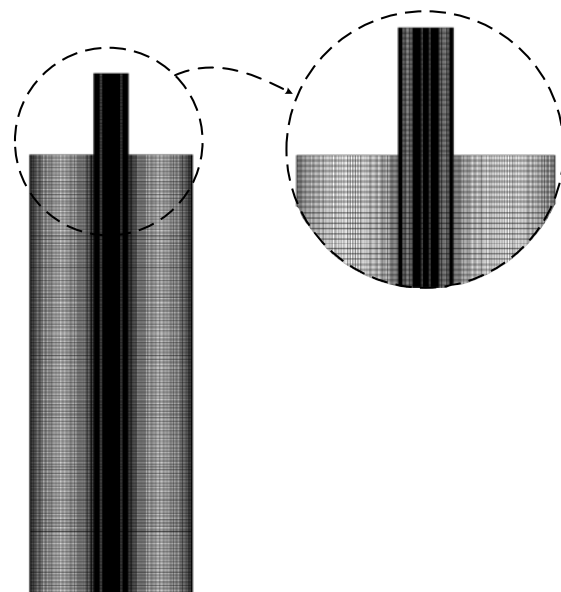
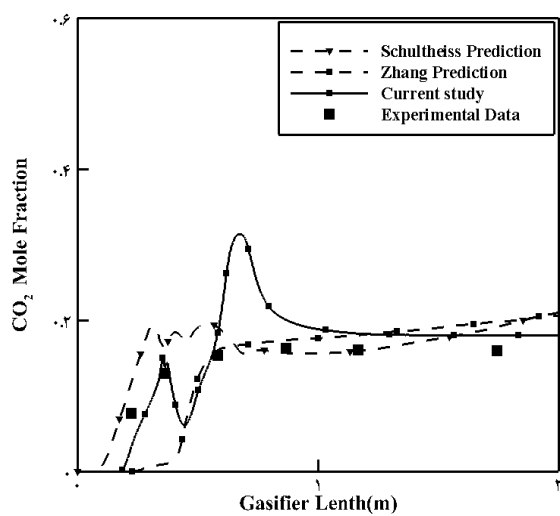
۴- روش حل مسئله

جریان درون گازی‌ساز به صورت توربولانسی و به صورت مخلوط گاز-ذرات جامد پودر زغال‌سنگ می‌باشد که به صورت حالت پایدار با استفاده از نرم‌افزار آنسیس-فلونت (Ansys-Fluent) شبیه‌سازی شده است. رویکرد در نظر گرفته شده جهت حل مسئله، رویکرد اویلرین-لاگرانژین است. تعاملات جریان توربولانسی و واکنش‌های شیمیایی با استفاده از مدل نرخ محدود/نرخ اتلاف گردابه، شبیه‌سازی شده است. زیرمدل‌های مختلفی جهت پیاده‌سازی فرآیندهای انجام شده درون گازی‌ساز در نظر گرفته شده است. مراحل اصلی یک فرآیند گازی‌سازی شامل خشک‌شدن ذرات سوخت

چگونگی روند تغییرات برای همه نتایج به دست آمده به خوبی پیش‌بینی شده است.



نمودار (۱) پروفیل‌های دما (الف) و سرعت (ب) در راستای محور گازی‌ساز برای سه مش‌بندی مختلف با تعداد سلول‌های ۲۲۰۰۰ (Mesh-1)، ۴۵۰۰۰ (Mesh-2) و ۸۰۰۰۰ (Mesh-3)



شکل (۲) نمایی از شبکه‌بندی هندسه گازی‌ساز در حالت Mesh-2

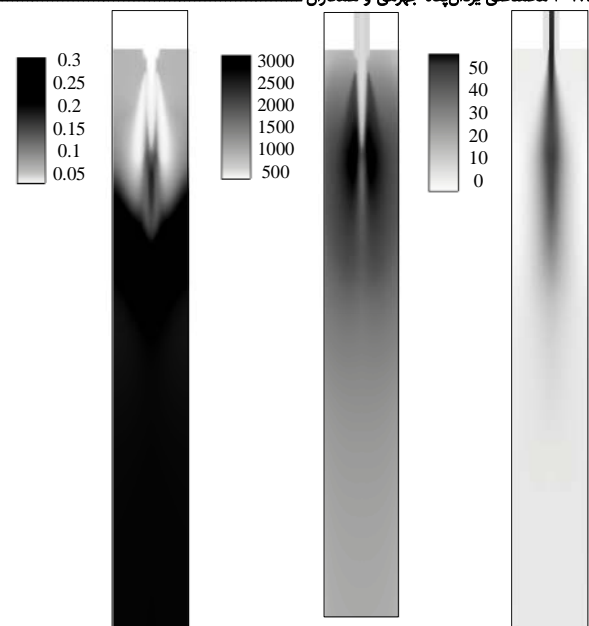
نمودار (۲) کسر مولی گونه‌ها CO, H₂ و CO₂ در راستای محور گازی‌ساز. نتایج حاصل از این شبه‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی^[15]، مطالعه انجام شده توسط ژانگ^[33] و نیز پیش‌بینی اسچالتر^[34] مقایسه شده است

زغال سنگ به درون محفظه گازی ساز با جذب گرما از محیط پیرامون رطوبت موجود در سوخت تبخیر شده و سپس تحت فرآیند تبخیر مواد فرار قرار می‌گیرد. مواد فرار آزاد شده که عمدتاً شامل H_2 و CO می‌باشند، به سرعت با اکسیژن تزیق شده از ورودی اولیه واکنش می‌دهند که نتیجه آن، آزاد شدن گرما ناشی از این واکنش‌ها است. به همین علت همان‌طور که در نمودار ۱- الف و نیز کانتور نمودار ۳- ب مشاهده می‌شود، دما در نزدیکی شعله، بالاتر از نواحی دیگر است. به تدریج با حرکت گاز به سمت خروجی گازی ساز از شدت دما کاسته می‌شود. دلیل آن را می‌توان در حاکم شدن واکنش‌های گرماگیر گازی سازی در نیمه انتهایی محفظه گازی ساز دانست. همان‌طور که از منحنی تغییرات گونه‌ها در راستای محور گازی ساز و چگونگی توزیع آن‌ها در نواحی مختلف درون گازی ساز مشاهده می‌شود، غلظت مولی CO_2 در نواحی نزدیک به شعله که فرآیند احتراق اتفاق می‌افتد بیشتر از نواحی دیگر است. با این حال، مقدار اکسیژن جهت انجام فرآیند احتراق کامل کافی نمی‌باشد. از این رو احتراق به صورت ناقص انجام می‌شود و منجر به افزایش غلظت مولی گونه‌های CO و H_2 می‌شود.

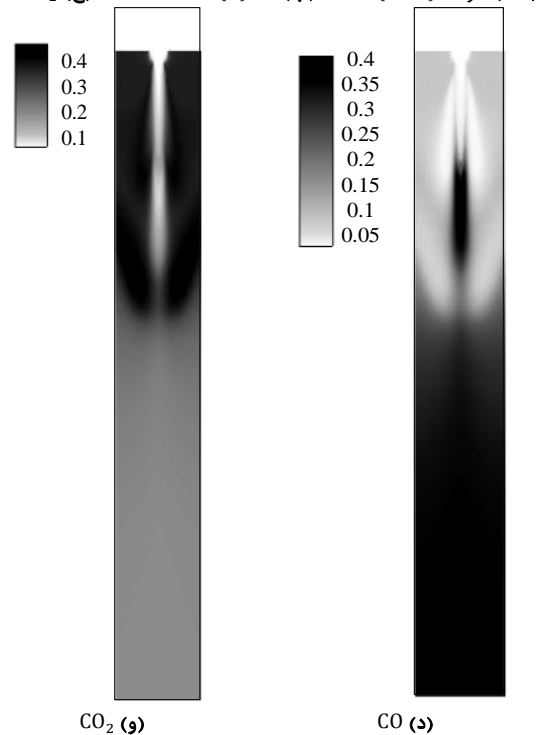
۲-۵- بررسی تأثیر مدل تبخیر مواد فرار

در این قسمت به مطالعه تأثیر مدل‌های مختلف تبخیر مواد فرار از زغال سنگ نمونه یوتا پرداخته شده است. چهار مدل تبخیر مواد فرار شامل مدل نفوذ شیمیایی، تک‌نرخی، مدل کوبیاشی و مدل نرخ ثابت (حالت‌های اول تا چهارم) مورد بررسی قرار گرفته است. شبیه‌سازی برای هرکدام از این حالت‌ها به صورت مجزا انجام شده است. در نمودار ۴، گونه‌های گازی مختلف تولید شده حین فرآیند گازی سازی در مدل‌های مختلف فرآیند تبخیر مواد فرار در راستای محور گازی ساز و در نمودار ۵ کسر مولی سینگاز در مرکز خروجی گازی ساز در مدل‌های مختلف نشان داده شده است. روند پیش‌بینی شده برای همه مدل‌ها مشابه یکدیگر است و تنها بسته به دقت هر مدل مقدار گازهای پیش‌بینی شده تولیدی تا حدودی با یکدیگر متفاوت می‌باشد. این تفاوت ناشی از پیش‌بینی متفاوت مواد فرار آزاد شده در هر مدل می‌باشد. به عنوان مثال مدل کوبیاشی مقدار گونه CO تولید شده در خروجی سینگاز را کمترین و مقدار CO_2 را بیشترین مقدار نسبت به دیگر مدل‌ها پیش‌بینی کرده است. اگرچه مدل نرخ ثابت مقدار CO_2 حداکثری بالاتری را تخمین زده است. مقادیر سینگاز پیش‌بینی شده در دو مدل CPD و نیز مدل تک‌نرخی نسبت به دیگر مدل‌ها با یکدیگر مشابهت بیشتری دارند. سیلان و وانگ^[6] که به شبیه‌سازی فرآیند گازی سازی در یک گازی ساز ورود هم‌زمان نمونه MHI (Mitsubishi Heavy Industries) پرداخته‌اند نیز به نتایج مشابهی دست یافته‌اند. مقادیر H_2 و CO پیش‌بینی شده در مدل CPD حداکثر و مقدار CO_2 پیش‌بینی شده توسط این روش حداقل می‌باشد.

همان‌طور که از مجموعه نمودارهای به دست آمده برای غلظت گونه‌های گازی به دست آمده مشاهده می‌شود، در همه مدل‌ها پس از اتمام فرآیند تبخیر مواد فرار از ذرات سوخت، غلظت مولی گونه‌ها در راستای محور گازی ساز تغییرات ناچیزی دارند. با این حال ترکیبات گازی پیش‌بینی شده در مدل‌های مختلف تا حدودی با یکدیگر متفاوت است. فرآیند تبخیر مواد فرار فرآیندی بسیار سریع است که موقعیت شعله در راستای محور گازی ساز توسط این فرآیند مشخص می‌شود. علاوه بر این مقدار قابل توجهی از محتوای هیدروژن و نیز مونوکسید کربن موجود در سوخت تزیق شده از طریق این فرآیند آزاد می‌شود. از مقایسه نتایج به دست آمده از مدل‌های



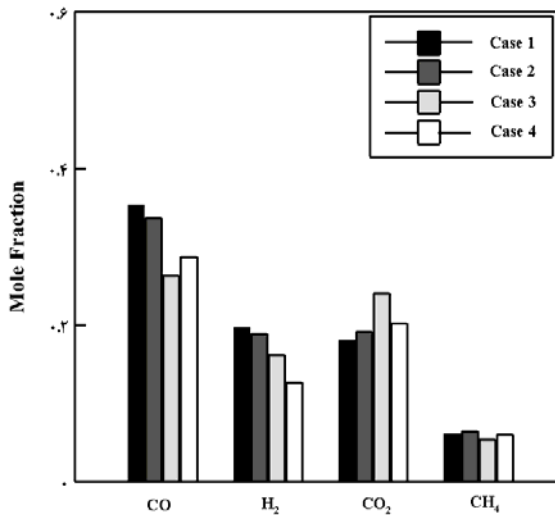
الف) سرعت (m.s⁻¹) (ب) دما (K) (ج) H_2



نمودار ۳) کانتورهای الف) سرعت محوری، (ب) دما و کسرهای مولی گونه‌های H_2 ، (د) CO ، (و) CO_2

در کار آزمایشگاهی انجام شده در مقاله^[15]، دما در خروجی گازی ساز اندازه‌گیری نشده است و محدوده آن تنها با استفاده از ملاحظات تعادلی واکنش شیفت آب-گاز تخمین زده شده است که در نمودار مربوط به پروفیل دمایی در راستای محور گازی ساز (نمودار ۱) با نماد مشخص نشان داده شده است. طبق این نمودار، مطابقت مناسب دمای پیش‌بینی شده از مدل ارائه شده با دمای تخمین زده شده^[15]، مشخص شده است. به طور کلی با مقایسه نتایج پیش‌بینی شده برای گونه‌های گازی به دست آمده از فرآیند گازی سازی مطابقت مناسب نتایج با داده‌های آزمایشگاهی و مطالعات مشابه دیگر نشان داده شده است و تخمین مناسبی از موقعیت شعله در راستای محور گازی ساز برای همه گونه‌ها ارائه شده است. پس از تزیق سوخت

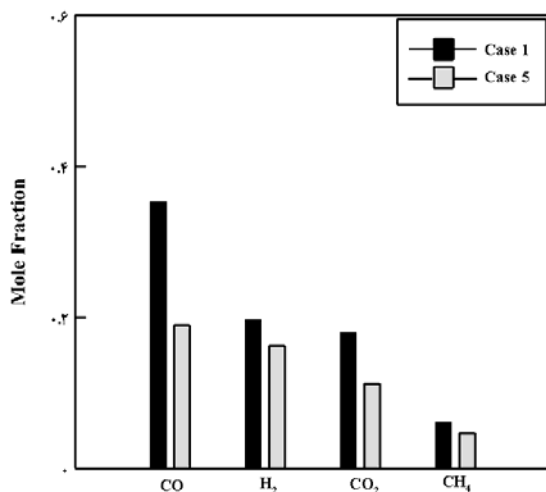
مختلف با داده‌های آزمایشگاهی مشاهده می‌شود که مدل CPD با دقت مطلوبی قادر است فرآیند گازی سازی زغال سنگ را در گازی ساز ورود هم‌زمان BYU تخمین زند.



نمودار ۵) کسر مولی سینگاز تولیدشده در مرکز خروجی گازی ساز در مدل‌های مختلف تیخیر مواد فرار شامل نفوذ شیمیایی (Case 1)، مدل تک‌نرخی (Case 2)، مدل کوبایاشی (Case 3) و مدل نرخ ثابت (Case 4)

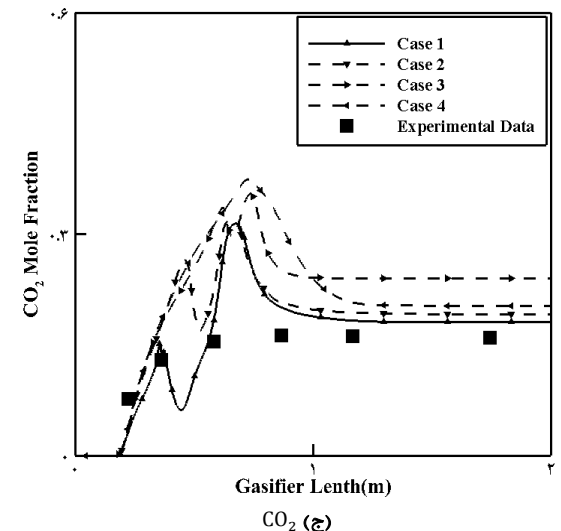
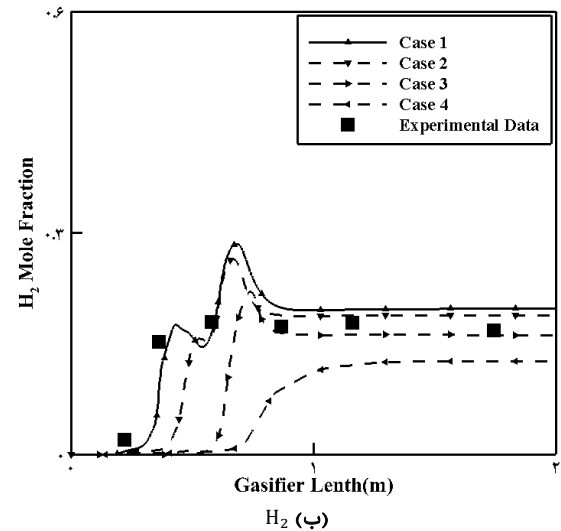
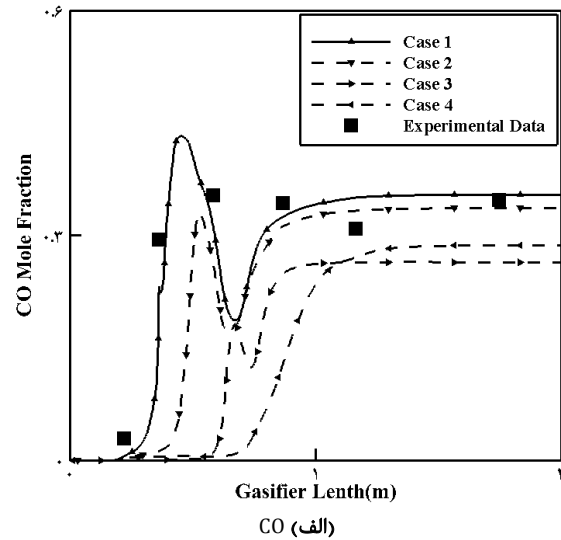
۳-۵- بررسی تاثیر گاز اکسیدکننده (اکسیژن در برابر هوا)

اکثر گازی‌سازهای نمونه ورود هم‌زمان با اکسیدکننده اکسیژن کار می‌کنند و تنها استثنا در این میان، گازی‌ساز نمونه MHI است. گازی‌ساز BYU نیز از اکسیدکننده اکسیژن جهت فرآیند گازی‌سازی استفاده می‌کند. در این قسمت به مطالعه تاثیر گاز اکسیدکننده و استفاده از هوا به جای اکسیژن در این گازی‌ساز پرداخته شده است (حالت پنجم). هوا به صورت ترکیبی از ۲۲٪ اکسیژن و ۷۸٪ نیتروژن به صورت وزنی در نظر گرفته شده است. دیگر شرایط عملکردی گازی‌ساز و نرخ تزریق سوخت و اکسیدکننده مانند حالت ۱ (حالت مبنا) در نظر گرفته شده است. ترکیبات گونه‌های به‌دست آمده از شیبه‌سازی در نمودار ۶ نشان داده شده است.



نمودار ۶) مقایسه کسر مولی گونه‌های تولیدشده در مرکز خروجی گازی‌ساز برای دو حالت اکسیدکننده هوا (Case 1) و اکسیدکننده اکسیژن (Case 5)

همان‌طور که مشاهده می‌شود غلظت مولی گونه CO در حالت استفاده از اکسیدکننده هوا نسبت به نمونه اکسیدکننده اکسیژن کاهش چشم‌گیری یافته است. این کاهش برای گونه H₂ کمتر است. غلظت‌های مولی گونه‌های CO₂ و CH₄ نیز برای این دو حالت



نمودار ۴) مقایسه کسر مولی گونه‌های تولیدشده در مدل‌های مختلف تیخیر مواد فرار شامل نفوذ شیمیایی (Case 1)، مدل تک‌نرخی (Case 2)، مدل کوبایاشی (Case 3) و مدل نرخ ثابت (Case 4)

همان‌طور که مشاهده می‌شود مدل نفوذ شیمیایی (حالت اول) پیش‌بینی قابل قبولی برای کسر مولی گونه‌های تولیدی نسبت به دیگر روش‌ها ارائه می‌دهد. مقادیر خطای برآورد شده در این حالت، نسبت به مقالات مشابه بهبود چشمگیری داشته است. در ادامه به مطالعه تأثیر استفاده از اکسیدکننده هوا به جای اکسیژن پرداخته شده است. مشاهده شده است که استفاده از اکسیدکننده هوا به جای اکسیژن سبب کاهش غلظت سینگاز تولیدی و در نتیجه کاهش راندمان گازی‌ساز خواهد شد.

- تشکر و قدردانی:** موردی توسط نویسندگان بیان نشد.
تاییدیه اخلاقی: موردی توسط نویسندگان بیان نشد.
تعارض منافع: موردی توسط نویسندگان بیان نشد.
سهم نویسندگان: موردی توسط نویسندگان بیان نشد.
منابع مالی: موردی توسط نویسندگان بیان نشد.

۷- فهرست علائم

A, B	ثابت‌های تجربی معادلات واکنش ($A = 4, B = 0.5$)
A_p	مساحت سطح خارجی ذرات سوخت
A_1, A_2	پارامترهای مدل تبخیر مواد فرار
A_r	عامل پیش‌نمایی
C_D	ضریب درگ
C_μ	ثابت ویسکوزیته
C_j	کسر مولی گونه j
C_{sw}	ضریب تورم
c_i	ظرفیت گرمایی ذرات زغال‌سنگ ($J kg^{-1} K^{-1}$)
c_p	ظرفیت گرمایی در فشار ثابت ($J kg^{-1} K^{-1}$)
D_{eff}	ضریب نفوذ جرمی گونه‌ها ($m^2 s^{-1}$)
d_p	قطر ذرات زغال‌سنگ (m)
E_r	انرژی فعال‌سازی ($J kmol^{-1}$)
$f_{D,p}$	نیروی درگ بر واحد جرم (N)
f_w	کسر جرمی رطوبت
G	تابش خالص در مکان ذرات ($kg \cdot s^{-3}$)
G_k	گرادیان سرعت متوسط
H	آنتالپی واکنش ($J \cdot kg^{-1}$)
h_s	آنتالپی محسوس فاز گازی
h_p	ضریب انتقال حرارت بین فازی
$M_{w,i}$	وزن مولکولی گونه i ($kg kmol^{-1}$)
m_v	جرم مواد فرار تبخیر شده (kg)
m_p	جرم ذرات سوخت (kg)
$m_{p,0}$	جرم اولیه ذرات سوخت (kg)
m_a	جرم محتوای خاکستر (kg)
Nu	عدد ناسلت
P	فشار (Pa)
Pr_t	عدد پراتنل توربولانسی
Q_G	ترم چشمه در معادله انرژی ذرات ناشی از واکنش
R	ثابت گاز، $8.314 J mol^{-1} K^{-1}$
Re_p	عدد رینولدز ذرات سوخت
Sc_t	عدد اشمیت توربولانسی
$S_{p,m}$	ترم چشمه در معادله بقای جرم فاز پیوسته
$S_{p,mom}$	ترم چشمه در معادله بقای مومنتوم فاز پیوسته
S_h	ترم چشمه ناشی از واکنش‌های همگن فاز گازی در معادله انرژی
$S_{p,h}$	ترم چشمه ناشی از تبادل بین فازی آنتالپی فاز گازی
S_{rad}	ترم چشمه تابشی
S_{p,Y_i}	ترم چشمه معادله انتقال گونه در فاز گازی
S_{Y_i}	ترم چشمه ناشی از واکنش‌های فاز گازی
T_g	دمای فاز گازی (K)

مقایسه شده‌اند. به‌طورکلی مشاهده می‌شود که غلظت همه گونه‌های مهم در حالت استفاده از اکسیدکننده هوا کاهش می‌یابند. این نتیجه ناشی از رقیق شدن گاز اکسیدکننده به دلیل ازدیاد گاز نیتروژن می‌باشد. با این حال استفاده از اکسیدکننده اکسیژن هزینه سرمایه‌گذاری پروژه را افزایش می‌دهد؛ زیرا نیاز است واحدهای تولیدکننده اکسیژن به سیستم اضافه شوند. استفاده از اکسیدکننده هوا بجای اکسیژن، می‌تواند منجر به تشکیل آلاینده NO_x گردد. در این مطالعه، موضوع آلاینده‌گی در نظر گرفته نشده است و به دلیل عدم در دسترس بودن اطلاعات کافی، از مقدار NO_x تولید شده صرف نظر شده است. این موضوع در مطالعات آینده مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

۶- نتیجه‌گیری

در این مطالعه به شبیه‌سازی عددی یک گازی‌ساز زغال‌سنگی نمونه ورود هم‌زمان پرداخته شده است. هندسه گازی‌ساز و شرایط عملکردی آن با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی موجود در مقالات مشخص شده است. واکنش‌ها و پارامترهای سینتیکی فرآیند گازی‌سازی با استفاده از داده‌های گازی‌سازی زغال‌سنگ در مقالات چاپ شده مشابه استخراج شده است. ابتدا با استفاده از نتایج آزمایشگاهی موجود، صحت نتایج به‌دست‌آمده از شبیه‌سازی صحت‌سنجی شده است و از استقلال جواب‌ها از شبکه‌بندی اطمینان حاصل شده است. علاوه بر این نتایج به‌دست‌آمده با دو مطالعه مشابه دیگر مقایسه و بررسی شده است. چهار مدل تبخیر مواد فرار معمول شامل مدل‌های نفوذ شیمیایی، تک‌نرخ، کوبایاشی و نرخ ثابت بررسی شده است. به کمک این مدل‌ها می‌توان نرخ تبخیر مواد فرار آزاد شده از ذرات سوخت تزریق شده و همچنین ترکیبات گونه‌های آزاد شده از آن را در شرایط عملکردی مختلف پیش‌بینی نمود. با این حال مدل‌های مختلف دارای دقت و سرعت محاسباتی متفاوتی می‌باشند.

نتایج به‌دست‌آمده از شبیه‌سازی نشان داده است که مدل نفوذ شیمیایی و مدل تک‌نرخ پیش‌بینی مشابهی ارائه می‌دهند. همچنین مدل‌های کوبایاشی و نرخ ثابت، نرخ تبخیر مواد فرار آزاد شده از سوخت را نسبت به دو مدل دیگر آهسته‌تر پیش‌بینی می‌کنند. روند پیش‌بینی شده برای تغییرات گونه‌های به‌دست‌آمده از مدل نفوذ شیمیایی بیشترین تطابق را با داده‌های آزمایشگاهی دارا می‌باشد. با این حال زمان محاسباتی مدل نفوذ شیمیایی بالاتر از مدل‌های دیگر است.

در جدول ۶ خطای موجود در روش‌های مختلف، جهت محاسبه کسر مولی گونه‌ها در نزدیکی خروجی گازی‌ساز آورده شده است و با مقادیر پیش‌بینی شده در مقالات مشابه مقایسه شده است.

جدول ۶ برآورد خطا در کسر مولی گونه‌های محاسبه شده در نزدیکی خروجی گازی‌ساز (%)

حالات‌های مورد مطالعه	درصد خطای گونه‌های گازی پیش‌بینی شده نسبت به مقدار آزمایشگاهی		
	CO ₂	H ₂	CO
کار انجام شده توسط ^[33] ژانگ	۲۴	۱۵	۱۸
کار انجام شده توسط ^[34] اسچالتر	۲۰	۵۸	۲۳
حالت اول (Case 1)	۱۳	۱۶	۲
حالت دوم (Case 2)	۲۰	۱۲	۳
حالت سوم (Case 3)	۵۰	۴	۲۳
حالت چهارم (Case 4)	۲۷	۲۴	۱۷

kinetics of a bituminous coal at elevated pressures: Entrained flow experiments and numerical simulations. *Fuel*. 2017;196:210-216.

8- Wu Y, Zhang J, Smith PJ, Zhang H, Reid C, Lv J, Yue G. Three-dimensional simulation for an entrained flow coal slurry gasifier. *Energy & Fuels*. 2010;24(2):1156-1163.

9- Wiinikka H, Toth P, Jansson K, Molinder R, Broström M, Sandström L, et al. Particle formation during pressurized entrained flow gasification of wood powder: Effects of process conditions on chemical composition, nanostructure, and reactivity. *Combustion and Flame*. 2018;189:240-256.

10- Bahari A, Atashkari K, Mahmoudimehr J. Numerical simulation and optimum operational point determination of a downdraft gasifier regarding pollutant emissions. *Modares Mechanical Engineering*. 2018;18(6):69-78. [Persian]

11- Cao Z, Li T, Zhang Q, Zhou H, Song C, You F. Systems modeling, simulation and analysis for robust operations and improved design of entrained-flow pulverized coal gasifiers. *Energy*. 2018;148:941-964.

12- Wang L, Jia Y, Kumar S, Li R, Mahar RB, Ali M, et al. Numerical analysis on the influential factors of coal gasification performance in two-stage entrained flow gasifier. *Applied Thermal Engineering*. 2017;112:1601-1611.

13- Hedman PO, Smoot LD, Smith PJ, Blackham AU. Entrained-flow gasification at elevated pressure. Volume 1. Pittsburgh: National Energy Technology Laboratory; 1987.

14- Brown BW, Smoot LD, Smith PJ, Hedman PO. Measurement and prediction of entrained-flow gasification processes. *AIChE Journal*. 1988;34(3):435-446.

15- Brown BW, Smoot LD, Hedman PO. Effect of coal type on entrained gasification. *Fuel*. 1986;65(5):673-678.

16- Vascellari M, Schulze S, Nikrityuk P, Safronov D, Hasse C. Numerical simulation of pulverized coal MILD combustion using a new heterogeneous combustion submodel, flow, Turbulence and Combustion. 2014;92(1-2):319-345.

17- Xu J, Zhao H, Dai Z, Liu H, Wang F. Numerical simulation of Opposed Multi-Burner gasifier under different coal loading ratio. *Fuel*. 2016;174:97-106.

18- Lu X, Wang T. Water-gas shift modeling in coal gasification in an entrained-flow gasifier – Part 2: Gasification application. *Fuel*. 2013;108:620-628.

19- Crowe CT, Sharma MP, Stock DE. The particle-source-in cell (PSI-CELL) model for gas-droplet flows. *Journal of Fluids Engineering*. 1977;99(2):325-332.

20- Jones JM, Lea-Langton AR, Ma L, Pourkashanian M, Williams A. Pollutants generated by the combustion of solid biomass fuels. New York: Springer; 2014.

21- Khan J, Wang T. Implementation of a demoinsturation and devolatilization model in multi-phase simulation of a hybrid entrained-flow and fluidized bed mild gasifier. *International Journal of Clean Coal and Energy*. 2013;2(3):35-53.

22- Pillai KK. Influence of coal type on devolatilization and combustion in fluidized beds. *Journal of the Energy Institute*. 1981;54:142-150.

23- Jupudi RS, Zamansky V, Fletcher TH. Prediction of light gas composition in coal devolatilization. *Energy & Fuels*. 2009;23(6):3063-3067.

24- Lu X, Wang T. Simulation of Ash deposition behavior in an entrained flow coal gasifier. *International Journal of Clean Coal and Energy*. 2015;4(2):43-59.

دمای ذره سوخت (K)	T_p
سرعت فاز گازی (ms^{-1})	u_g
سرعت ذره سوخت (ms^{-1})	v_p
ضریب استوکیومتریکی واکنش i در واکنش r	$v'_{i,r}$
ضریب استوکیومتریکی محصول j در واکنش r	$v''_{j,r}$
کسر جرمی گونه i ام	Y_i

علامه یونانی

اتلاف ویسکوزیته	ϕ
تانسور تنش مؤثر	τ_{eff}
چگالی فاز گازی (kg m^{-3})	ρ_g
چگالی ذره سوخت (kg m^{-3})	ρ_p
ویسکوزیته دینامیکی مؤثر سیال ($\text{Pa} \cdot \text{s}$)	μ_{eff}
ویسکوزیته فاز گازی ($\text{Pa} \cdot \text{s}$)	μ_g
ویسکوزیته توربولانسی	μ_t
نرخ اتلاف توربولانسی ($\text{m}^2 \text{s}^{-3}$)	ε
قابلیت انتشار ذره سوخت	ε_p
ثابت استفان- بولتزمن	σ
قابلیت هدایت حرارتی توربولانسی ($\text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}$)	λ
نفوذ حرارتی دینامیکی مؤثر	α_{eff}
ضریب استوکیومتریکی واکنش دهنده‌ها	v'
ضریب استوکیومتریکی فرآورده‌ها	v''

حروف اختصار

دینامیک سیالات محاسباتی	CFD
راندمان تبدیل کربن	CCE
مدل نفوذ شیمیایی	CPD
ارزش حرارتی بالا	HHV
سیکل ترکیبی شامل گازی‌سازی	IGCC
دانشگاه بریگهام یانگ	BYU

زیرنویس‌ها

آرگون	Ar
مؤثر	eff
فاز گاز	g
فاز ذره	p

منابع

- Garg A, Kazunari K, Pulles T, Watkinson AP, Chen HP, Kim JR. IPCC guidelines for national greenhouse gas inventories. Unknown city: Unknown Publishing; 2006.
- N. E. T. L. (NETL). Gasification database: active and planned commercial gasification plants [Internet]. Paris, France: IEA; 2007 [Cited 13 Sep 2018]. Available from: www.iea.org.
- Chen C, Horio M, Kojima T. Numerical simulation of entrained flow coal gasifiers. Part I: modeling of coal gasification in an entrained flow gasifier. *Chemical Engineering Science*. 2000;55(18):3861-3874.
- Zitney SE, Guenther C. Gasification CFD modeling for advanced power plant simulations. National Energy Technology Laboratory, Morgantown, WV 26507-0880, USA. 2005:1-12.
- Silaen A, Wang T. Effects of fuel injection angles on performance of a two-stage coal gasifier. In: Proceeding of 23rd Annual International Pittsburgh Coal Conference; Energy, Environment and Sustainable Development; 2006; Pittsburgh, PA. Pittsburgh, USA: Annual International Pittsburgh Coal Conference -CD-ROM Edition; 2009. p. P99.
- Silaen A, Wang T. Effect of turbulence and devolatilization models on coal gasification simulation in an entrained-flow gasifier. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2010;53(9-10):2074-2091.
- Steibel M, Halama S, Geißler A, Spliethoff H. Gasification

approach [Dissertation]. Worcester, Massachusetts: Worcester Polytechnic Institute; 2006.

31- Wu Y, Smith PJ, Zhang J, Thornock JN, Yue G. Effects of turbulent mixing and controlling mechanisms in an entrained flow coal gasifier. *Energy & Fuels*. 2010;24(2):1170-1175.

32- Park SS, Jeong HJ, Hwang J. 3-D CFD modeling for parametric study in a 300-MWe one-stage oxygen-blown entrained-bed coal gasifier. *Energies*. 2015;8(5):4216-4236.

33- Zhang C. Numerical modeling of coal gasification in an entrained-flow gasifier. In: Proceedings of the ASME 2012 International Mechanical Engineering Congress & Exposition; 2012 Nov 9-15; Houston, Texas, USA. ASME; 2013. p. 1193-1203.

34- Schultheiss KS. Computational fluid dynamics (cfd) modeling of a laboratory scale coal gasifier [Dissertation]. Statesboro, Georgia: Georgia Southern University; 2013.

25- Fletcher TH, Kerstein AR, Pugmire RJ, Grant DM. Chemical percolation model for devolatilization. 2. Temperature and heating rate effects on product yields. *Energy & Fuels*. 1990;4(1):54-60.

26- Kobayashi H, Howard JB, Sarofim AF. Coal devolatilization at high temperatures. Symposium (International) on Combustion. 1977;16(1):411-425.

27- Cui H, Turn SQ, Keffer V, Evans D, Tran T, Foley M. Study on the fate of metal elements from biomass in a bench-scale fluidized bed gasifier. *Fuel*. 2013;108:1-12.

28- Yang H, Yan R, Chen H, Zheng C, Lee DH, Liang DT. Influence of mineral matter on pyrolysis of palm oil wastes. *Combustion and Flame*. 2006;146(4):605-611.

29- Watanabe H, Otaka M. Numerical simulation of coal gasification in entrained flow coal gasifier. *Fuel*. 2006;85(12-13):1935-1943.

30- Callaghan CA. Kinetics and catalysis of the water-gas-shift reaction: a microkinetic and graph theoretic