

شبیه سازی دینامیکی فرایند گازسازی / احتراق ذغال سنگ در یک کوره هم جهت

مرتضی بقالها^۱، ایمان شهیدی^۲، افشین زبیری^۳، محمد رضا فیاض^۴

دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده مهندسی شیمی و نفت

baghalha@sharif.edu

چکیده

در مقاله حاضر یک مدل ریاضی برای شبیه سازی کوره Texaco downflow entrainment ارائه می شود که در آن از پسماند فرآیند coal liquefaction و دوغاب ذغال سنگ-آب به عنوان خوراک فرآیند استفاده می شود. تغییرات دما و غلظت در طول کوره با استفاده از حل معادلات جرم و انرژی و با در نظر گرفتن سینتیک واکنشهای گازسازی و احتراق مدل سازی شده اند. حاصل این مدل سازی یک برنامه کامپیوتری در بستر نرم افزار MATLAB می باشد که در دانشگاه شریف توسعه داده شده است. نتایج بدست آمده از حل این برنامه در شرایط عملیاتی مختلف با نتایج حاصل از عملکرد صنعتی یک واحد عملیاتی از شرکت Texaco مقایسه شده است. نتایج حاصل از مدل سازی حاضر بسیار نزدیک به اطلاعات تجربی می باشند. همچنین محاسبات نشان می دهند که برای احتراق مستقیم ذغال سنگ مقدار نسبت $O_2/Fuel$ باید در حدود ۳،۵ باشد. در چنین شرایطی کل گازهای سنتز به طور کامل به H_2O و CO_2 تبدیل می شوند. در شرایطی که بیشترین میزان گازهای سنتز با بیشترین ارزش حرارتی مورد نیاز باشد محدوده بهینه برای نسبت $Steam/Fuel$ بر طبق محاسبات معادل $0/6 - 0/3$ می باشد.

۱- مقدمه

فرآیند تولید گاز سوخت از ذغال سنگ یک تکنولوژی تثبیت شده است که طی آن ذرات کوچک ذغال سنگ توسط بخار آب و اکسیژن در یک فرآیند گرمازا به گازهای قابل احتراقی مانند مونوکسید کربن، هیدروژن و مقداری متان و دی اکسید کربن تبدیل می شود. این مخلوط قابل احتراق می تواند به عنوان سوخت به کار برده شود و معمولاً استفاده آن در توربین گازی جهت تولید الکتریسیته می باشد. گاهی اوقات اکسیژن خاص در فرآیندی تحت عنوان oxygen-gasification مورد استفاده قرار می گیرند یا ممکن است هوا در فرآیند air-gasification مورد استفاده قرار گیرد که در این صورت محصول گازی دارای نیتروژن نیز خواهد بود. همچنین با توجه به مقدار بالای نیتروژن و گرمای زیاد شعله مقدار قابل توجهی مواد آلاینده NO_x در سیستم air-gasification بوجود می آید. برای جلوگیری از این موضوع و افزایش راندمان فرآیند تقریباً در همه موارد از سیستم oxygen-gasification استفاده می شود. [۱،۲]

برای افزایش مقدار هیدروژن در گاز تولید شده بخار می تواند به جریان oxidant اضافه شود. به عنوان راه دیگر وقتی ذغال سنگ در غالب مخلوط دوغابی آب-ذغال سنگ تزریق می شود، آب به عنوان مایع می تواند اضافه شود. استفاده بهینه از ذغال سنگ با بکارگیری تکنولوژی گازسازی چرخه ترکیبی (IGCC) قابل دستیابی می باشد. همانگونه که از شکل (۱) مشخص است در این فرآیند در یک gasifier سوخت گازی $CO+H_2$ تولید می شود. گاز سوختی فوق سپس تصفیه شده و در محفظه

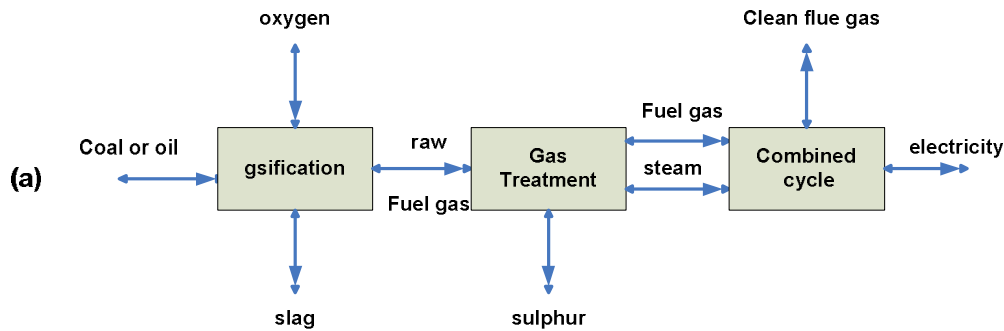
۱- استادیار دانشکده مهندسی شیمی و نفت- دانشگاه صنعتی شریف

۲- کارشناس مهندسی شیمی و نفت- دانشگاه صنعتی شریف

۳- کارشناس مهندسی شیمی و نفت- دانشگاه صنعتی شریف

۴- کارشناس مهندسی شیمی و نفت- دانشگاه صنعتی شریف

احتراق یک توربین گازی به همراه هوای فشرده و برای تولید گازهای داغ در فشار بالا سوزانده می شود. گازهای حاصله در توربین گازی منبسط می شوند و کمپرسور مولد تولید برق را به حرکت می اندازند. گازهای داغ خروجی از توربین گازی برای افزایش دمای آب داخل بویلر متعاقباً مورد استفاده قرار می گیرند که در واقع سبب به حرکت درآوردن یک توربین بخار شده و حرکت آن موجب تولید بیشتر نیروی الکتریکی می شود.



شکل ۱- استفاده از ذغال سنگ در سیکل ترکیبی IGCC برای تولید الکتریسیته

واحد IGCC نمایش داده شده در شکل (۱) در صورت آلودگی زیاد Raw Fuel Gas و نیاز به Gas Treatment شدید می تواند به بازده خالص حدود ۴۳-۴۵٪ برسد. در صورت پایین بودن ناخالصی های گوگردی در ذغال سنگ مرحله تمیز کردن گاز حاصله از واحد Gasification حذف می شود. در این شرایط لازم است تا واکنش های سوخت ناقص کربن در Gasifier به واکنش های احتراق کامل آن تبدیل شوند. زیرا در چنین شرایطی بازدهی انرژی کل فرایند به ۵۰٪ نیز خواهد رسید. [۳] لذا دو فرآیند gasification و احتراق مستقیم ذغال سنگ تمیزدو تکنولوژی رقیب در تولید الکتریسیته می باشند. از لحاظ تئوری هر دو این فرایندها را می توان در واحد Texaco Entrainment Gasifier ایجاد کرد. [۴] این فرایند یکی از بهترین فرایندهای گازسازی در مقیاسه با تکنولوژی دی-گر شرکت ها می باشد. [۵،۶]

۲- بررسی واحد Texaco Entrainment Gasifier

یک Entrainment gasifier عبارت است از یک رآکتور با جریان همسو که در آن هیدروکربن های سنگین و جامد (که به صورت پودر درآمده است) با اکسیژن و بخار آب واکنش داده و طی این فرآیند سوخت های گازی با ارزش های حرارتی متغیر از کم تا زیاد حاصل می شود. زمان اقامت در این نوع رآکتور در حدود ۵ ثانیه بوده و به طور کلی بسیار کمتر از زمان مربوطه برای رآکتور های با بستر ثابت و بستر سیال می باشد. برای دست یافتن به مقدار بالای محصول می بایست که رآکتور مورد استفاده دارای سیستم پس خور بوده که طی آن هیدروکربن های واکنش نداده به همراه مقدار قابل توجهی اکسیژن واکنش می دهند. در نتیجه در طول واکنش محیطی مساعد با درجه حرارت بالا برای فرآیند gasification با سرعت مناسب و بالا ایجاد می کنند. علاوه بر آن اغلب واکنش های gasification گرما گیر بوده و احتیاج به گرمای بالا داشته که برای برآورده شدن این امر احتیاج به گرمای ناشی از فرآیند های احتراق و یا یک منبع گرمایی خارجی می باشد. در حال حاضر استفاده از مواد سوختی Light oils, asphalts و coal-water slurries به عنوان خوراک برای فرآیند گازسازی میسر می باشد. اخیراً شرکت Texaco نشان داده است که ایجاد گازهای سنتز از پسماند فرآیند میعان ذغال سنگ توسط entrainment gasifier امکان پذیر می باشد. در حال حاضر اغلب فرآیند های میعان ذغال سنگ به هیدروژن یا گازهای سنتز جهت حل کردن ذغال سنگ نیاز دارند. سیستم Entrainment Gasifier قادر به تولید هیدروژن یا گازهای سنتز مورد نیاز برای میعان ذغال سنگ از جزء غیر میعان یافته آن می باشد. یک Entrainment gasifier نسبت به روش های دیگر Gasification دارای مزیت های زیر می باشد:

۱- توانایی یکپارچه سازی هر گونه ذغال سنگ یا پسماند آن بدون توجه به نحوه تجمع و کیک سازی آنها

۲- ظرفیت پذیرش بالای ذغال سنگ به خصوص در فشارهای بالا

۳- گازهای تولیدی عاری از قطران و فنول ها

۴- بهره وری بالای کربن به علت سرعت بالای واکنش

علیرغم مطالب فوق نیاز به دمای بالای عملیاتی سبب ایجاد زبان های زیر می شود:

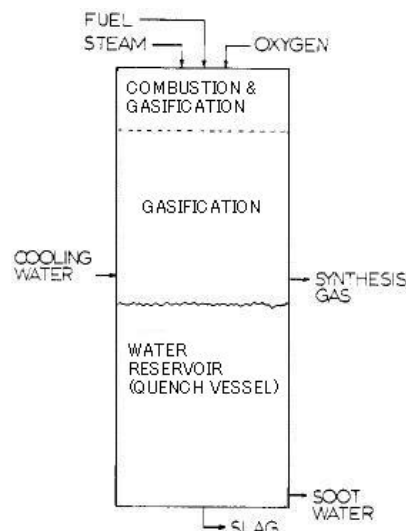
۱- ایجاد مشکل در زمینه انتخاب نوع مواد نسوز و ساختمانی در منطقه احتراق

۲- مسئله بهره وری مناسب از حرارت موجود در گازهای داغ خروجی

۳- مقدار زیاد اکسیژن مورد نیاز جهت حفظ شرایط عملیاتی با دمای بالا

واحد **entrainment gasifier** شرکت **Texaco** دارای قطری معادل ۵ ft و طولی معادل ۲۰ ft می باشد. [۴] این مخزن که از جنس استیل می باشد که از داخل به دو قسمت عمده تقسیم شده است (شکل ۲). بخش فوقانی این واحد از مواد مقاوم در مقابل حرارت برای شرایط خاص حرارتی طراحی شده است و در آن فرآیند های احتراق و **gasification** صورت می گیرد. بخش تحتانی مربوط به موقعیت آبرسانی این مجموعه می باشد به طوریکه یک منبع آب در پایین مجموعه قرار داشته و دائما آب خنک از آن به این بخش تزریق می شود. گاز سنتز تولیدی خروجی از بخش فوقانی قبل از ترک از تیوب عمیق موجود در بخش تحتانی که حاوی آب خنک می باشد عبور می کند بنابراین دوده و لخته و هیدروکربن های واکنش نداده قبل از ترک در آب باقی می ماند و بعدا تصفیه می شوند و در نهایت گاز سنتز اشباع از محتوای گاز تجمع یافته در فضای بالای آب پاک می شود. مواد خرد شده و پسماند حاصل از فرآیند قطران ذغال سنگ توسط ذوب قابل پمپ کردن می باشند و در دمای ۴۰۰ تا ۵۰۰ درجه فارنهایت نگهداشته می شوند و سپس با محلول ۲ تا ۷ درصد آروماتیک ادغام می شوند. مواد ناشی از مخلوط پسماند مذاب، اکسیژن و بخار به قسمت **proprietary Texaco burner** در قسمت بالای واحد خوراک داده می شود. تمام عملیات فوق با استفاده از پسماند قطران ذغال سنگ در فشاری معادل ۲۴ اتمسفر رخ می دهد.

برای اجرای عملیات فوق با استفاده از دوغاب ذغال سنگ- آب، ذغال سنگ با آب مخلوط شده و تا دمای زیر دمای اشباع پیش گرم می شود و بنابراین آب موجود در دوغاب به صورت مایع وارد راکتور می شود. فشار عملیاتی برای خوراک دوغاب ذغال سنگ - آب حدود ۲۱ اتمسفر می باشد. در مقاله حاضر مدل سازی و شبیه سازی یک **non-recycling entrainment gasifier** در حالت پایا ارائه می شود. این مدل قابلیت طراحی و شبیه سازی واحدهای گازسازی و احتراق ذغال سنگ را فراهم می سازد. مهمترین پارامترهای این فرایند یعنی دما و غلظت مواد مختلف در گاز خروجی با استفاده از این برنامه قابل پیش بینی خواهند بود.



شکل ۲- شکل شماتیک از واحد **entrainment gasifier** شرکت **Texaco**

۳- مدل سازی راکتور entrainment gasifier شرکت Texaco

در حالت کلی فرمول شیمیایی ذغال سنگ با پارامترهای مجهول به صورت $C\alpha H\beta O\gamma N\delta S\epsilon A$ می باشد. بسته به نوع ذغال سنگ به هر کدام از مقادیر مجهول مقداری اختصاص می یابد. در این کار تحقیقاتی شبیه سازی بر اساس یک ذغال سنگ خاص از معادن ذغال سنگ آمریکا انجام شده است. اجزاء تشکیل دهنده این ذغال سنگ در جدول ۱ آورده شده است [۴]. پس از تبدیل درصد های وزنی داده شده در جدول ۱ به درصد های مولی فرمول مورد نظر به صورت $C_{5.4083}H_{3.65}O_{1.062}N_{0.0892}S_{0.0925}A$ درآمده و واکنش های مربوطه بر اساس آن انجام می گیرد. مقادیر دبی وزنی جریان های ورودی در جدول ۲ داده شده است. واکنش های مطرح در یک واحد گاز سازی ذغال سنگ را می توانیم به دو گروه عمده شامل واکنش های هتروژن گاز-جامد و واکنش های هموزن گازی تقسیم بندی کنیم (جدول ۳). در جدول ۳ واکنش های ۱ الی ۴ واکنش های هتروژن ذغال سنگ و اجزای مختلف در فاز گاز را تعریف می کنند. واکنش های ۵ الی ۸ نیز بیانگر واکنش های مهم هموزن بین اجزاء گازی می باشد.

جدول ۱- درصد وزنی اجزاء ذغال سنگ مورد بررسی

ASH	O	S	N	H	C	درصد جرمی عناصر
۲۵.۴	۱.۷	۲.۹۶	۱.۲۵	۳.۶۵	۶۴.۹	

جدول ۲- دبی وزنی جریان های ورودی به واحد Gasification

Oxygen / Fuel	Steam / Fuel	Fuel rate(g/s)
۰.۷	۰.۳	۱۲۶.۱

جدول ۳- واکنش های انجام شده در واحد Gasification

	واکنش های مربوط به بخش احتراق و Gasification	نوع واکنش
1	$C\alpha H\beta O\gamma N\delta S\epsilon A + (\alpha/\Phi - \gamma/2 + \beta/2 - \epsilon) O_2 \rightarrow 2(1 - 1/\Phi) \alpha CO + (2/\Phi - 1) \alpha CO_2 + (\beta/2 - \epsilon) H_2O + \epsilon H_2S + \delta/2 N_2 + ash$	واکنش ذغال سنگ با اکسیژن
2	$C\alpha H\beta O\gamma N\delta S\epsilon A + (\alpha - \gamma) H_2O \rightarrow \alpha CO + (\alpha - \gamma + \beta/2 - \epsilon) H_2 + \epsilon H_2S + \delta/2 N_2 + ash$	واکنش ذغالسنگ با بخار
3	$C\alpha H\beta O\gamma N\delta S\epsilon A + \alpha CO_2 \rightarrow 2 \alpha CO + \gamma H_2O + (\beta/2 - \epsilon - \gamma) H_2 + \epsilon H_2S + \delta/2 N_2 + ash$	واکنش ذغال سنگ با دی اکسید کربن
4	$C\alpha H\beta O\gamma N\delta S\epsilon A + (2 \alpha + \gamma + \epsilon - \beta/2) H_2 \rightarrow \alpha CH_4 + \gamma H_2O + \epsilon H_2S + \delta/2 N_2 + ash$	واکنش ذغال سنگ با هیدروژن
5	$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	واکنش های جانبی در فاز گاز
6	$CH_4 + H_2O \leftrightarrow CO_2 + 3H_2$	
7	$CO + 1/2 O_2 \rightarrow CO_2$	
8	$H_2 + 1/2 O_2 \rightarrow H_2O$	

با توجه به واکنش های در نظر گرفته شده لازم است تا معادلات موازنه جرم و انرژی به صورت دیفرانسیلی بر روی المان dz نوشته و سپس انتگرال گیری شوند. موازنه جرم دیفرانسیلی بر روی المان dz در طول راکتور برای مواد مختلف در جدول ۴ نمایش داده شده اند. همچنین در جدول ۵ موازنه انرژی دیفرانسیلی بر روی المان dz در طول راکتور برای فازهای گاز و جامد نشان داده شده اند.

جدول ۴- موازنه جرم دیفرانسیلی بر روی المان dz در طول راکتور برای مواد مختلف*

$F_c \frac{dx_c/dz}{(6/(\rho_s d_p))} = - (r_1 + r_2 + r_3 + r_4) a$; $X_c = (F_c^\circ - F_c) / F_c^\circ$; $a = F_c / (A_t V_s)$	کربن:
$F_{H_2O} \frac{dx_1/dz}{(6/(\rho_s d_p))} = - (\beta / 2 - \varepsilon) r_1 + (\alpha - \gamma) r_2 - \gamma r_3 - \gamma r_4 + r_5 + r_6 + r_8$; $X_1 = (F_{H_2O}^\circ - F_{H_2O}) / F_{H_2O}^\circ$	بخار:
$F_{H_2O} \frac{dx_2/dz}{(6/(\rho_s d_p))} = (\alpha - \gamma + \beta / 2 - \varepsilon) r_2 + (\beta / 2 - \varepsilon - \gamma) r_3 + r_5 + 3 r_6 - r_8$; $X_2 = F_{H_2} / F_{H_2O}$	هیدروژن:
$F_{H_2O} \frac{dx_3/dz}{(6/(\rho_s d_p))} = (\alpha / 2) r_1 + \alpha r_2 + 2 \alpha r_3 - r_5 + r_6 - r_7$; $X_3 = F_{CO} / F_{H_2O}$	مونوکسید کربن:
$F_{H_2O} \frac{dx_4/dz}{(6/(\rho_s d_p))} = (\alpha / 2) r_1 - \alpha r_3 + r_5 + r_7$; $X_4 = F_{CO_2} / F_{H_2O}$	دی اکسید کربن:
$F_{H_2O} \frac{dx_5/dz}{(6/(\rho_s d_p))} = \alpha r_4 - r_6$; $X_5 = F_{CH_4} / F_{H_2O}$	متان:
$F_{O_2} \frac{dx_6/dz}{(6/(\rho_s d_p))} = - (3^a / 4 - \gamma / 2 + \beta / 2 - \varepsilon / 2) r_6 - 1/2 r_7 - 1/2 r_8$; $X_6 = (F_{O_2}^\circ - F_{O_2}) / F_{O_2}^\circ$	اکسیژن:
$F_{H_2O} \frac{dx_7/dz}{(6/(\rho_s d_p))} = \varepsilon (r_1 + r_2 + r_3 + r_4)$; $X_7 = F_{H_2S} / F_{H_2O}$	دی اکسید گوگرد:
$F_{H_2O} \frac{dx_8/dz}{(6/(\rho_s d_p))} = \delta / 2 (r_1 + r_2 + r_3 + r_4)$; $X_8 = F_{N_2} / F_{H_2O}$	نیتروژن:

* در این جدول r_i نشان دهنده سرعت واکنش شماره i تعریف شده در جدول (۳) می باشد. همچنین در این جدول پارامتر F_i مقدار دبی مولی جزء i می باشد.

جدول ۵- موازنه انرژی دیفرانسیلی بر روی المان dz در طول راکتور برای فازهای گاز و جامد

$d(W_{gi} \cdot C_p \cdot T_g) / dz = -(A_t \cdot a) [e \cdot f \cdot \sigma (T_g^4 - T_s^4) + h_c (T_g - T_s)] + \sum_k (-\Delta H_k) \cdot r_k \cdot A_t - H_{loss}$ $k = 5, 6, 7, 8$	فاز گازی
$d(W_s \cdot C_p \cdot T_s) / dz = a \cdot A_t [e \cdot f \cdot \sigma (T_g^4 - T_s^4) + h_c (T_g - T_s)] + (a \cdot A_t) \sum_j (-\Delta H_j) \cdot r_j$ $j = 1, 2, 3, 4$	فاز جامد

در فرمول های داده شده در جدول ۴ مقدار سرعت اولیه ذرات یا V_s برابر 300 cm/s و همچنین فشار کل برابر 24 atm در نظر گرفته شده است. مقدار $rate$ واکنش ها r_i با استفاده از قالب کلی زیر محاسبه می شوند:

$$r_i = 1 / [(1/k_{dg}) + (1/k_s Y^2) + (1/k_{dash})(1/Y - 1)] (P_i - P_i^*)$$

$$Y = r_c / R$$

در رابطه فوق k_{dg} ثابت سرعت نفوذ گاز و k_s ثابت سرعت نفوذ جامد بوده و k_{dash} ثابت سرعت لایه ای نفوذ برای خاکستر است که به مقدار ضریب نفوذ گاز و تخلخل لایه خاکستری بستگی داشته و بر اساس رابطه تجربی زیر تخمین زده می شود:

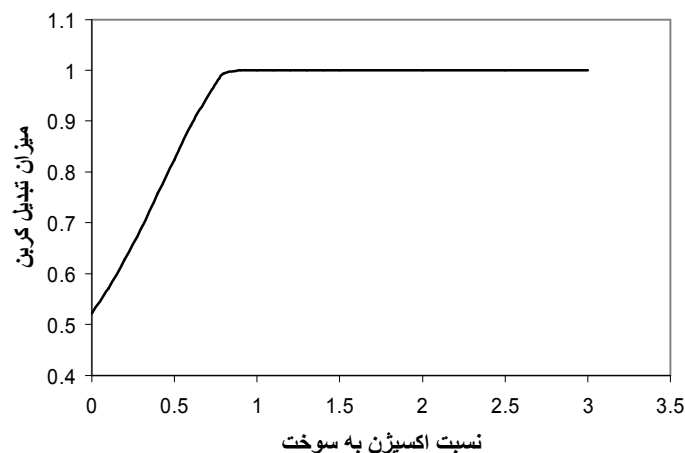
$$k_{dash} = \varepsilon^{2-3} \cdot k_{dg}$$

شایان ذکر است که مقادیر ظرفیت های حرارتی برای هر فاز مقدار مختص به خود را دارا می باشد. همچنین در محاسبات ضریب نشر یا e برابر $0/9$ ضریب شکل یا F برابر واحد و همچنین ضریب انتقال حرارت یا h_c برابر 2 Kg/dp در نظر گرفته شده است.

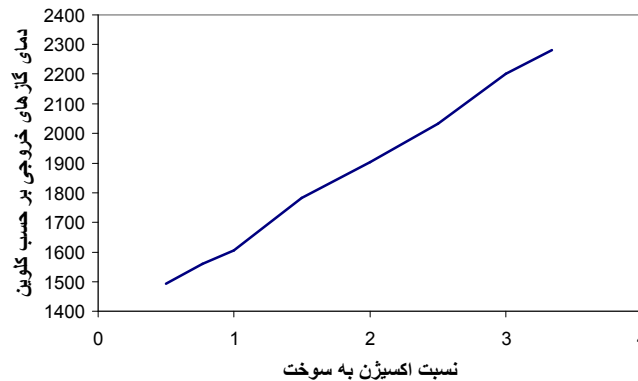
حاصل این شبیه سازی یک برنامه کامپیوتری در بستر نرم افزار MATLAB می باشد که در دانشگاه شریف توسعه داده شد. نتایج بدست آمده از حل این برنامه در شرایط عملیاتی مختلف با نتایج حاصل از عملکرد صنعتی یک واحد عملیاتی از شرکت Texaco مقایسه شده است [۴]. در واحد فوق از چندین نوع خوراک به صورت پسماند ذغال سنگ و دوغاب ذغال سنگ - آب استفاده شده است.

۴- نتایج شبیه سازی

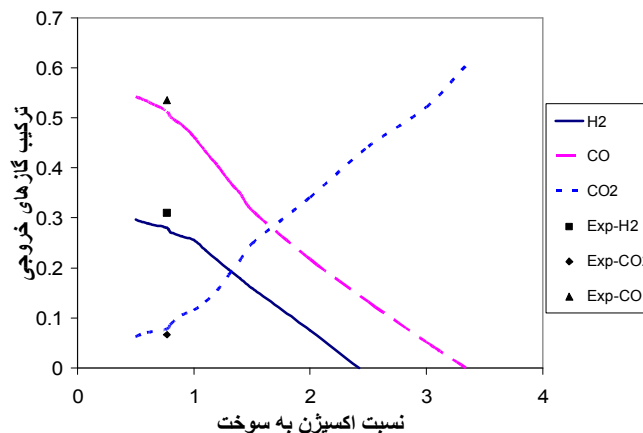
با استفاده از نرم افزار توسعه داده شده در گروه ما، اثر نسبت های مختلف آب و اکسیژن به مقدار سوخت ورودی بر دما و درصد مونوکسید کربن و دی اکسید کربن و هیدروژن در گاز خروجی مورد بررسی قرار گرفت. به عنوان شرایط مرجع، یکی از آزمایشات ذکر شده در مقاله Wen [۴] در نظر گرفته شد. شرایط این آزمایش مرجع عبارتند از: فشار ۲۴ اتمسفر، دبی سوخت ورودی $126/11 \text{ g/s}$. همچنین نسبت های O_2/fuel و steam/fuel به ترتیب برابر $0/77$ و $0/3$ می باشند. در شکل های ۳ تا ۵ اثر تغییر نسبت O_2/fuel بر عملکرد واحد گازسازی/احتراق نشان داده شده است. شکل (۳) نشان می دهد که درصد تبدیل ذغال سنگ برای مقادیر O_2/fuel حدود ۱ و بیشتر به 100% می رسد. در شکل (۴) نشان داده شده است که دمای خروجی از راکتور با افزایش نسبت O_2/fuel به صورت پیوسته افزایش می یابد. همانطور که در نمودار ۵ نشان داده شده است با افزایش مقدار اکسیژن مقادیر H_2 و CO



شکل ۳- میزان درصد تبدیل کربن بر حسب تابعی از نسبت O_2/Fuel . نسبت Steam/Fuel برابر با $0/3$ می باشد.



شکل ۴- دمای گازهای خروجی بر حسب تابعی از نسبت $O_2/Fuel$. نسبت $Steam/Fuel$ برابر با ۰.۳ می باشد.



شکل ۵- ترکیب گازهای خروجی بر حسب تابعی از نسبت $O_2/Fuel$. نسبت $Steam/Fuel$ برابر با ۰.۳ می باشد. نقاط داده شده در این شکل، مربوط به اطلاعات تجربی [۴] می باشد.

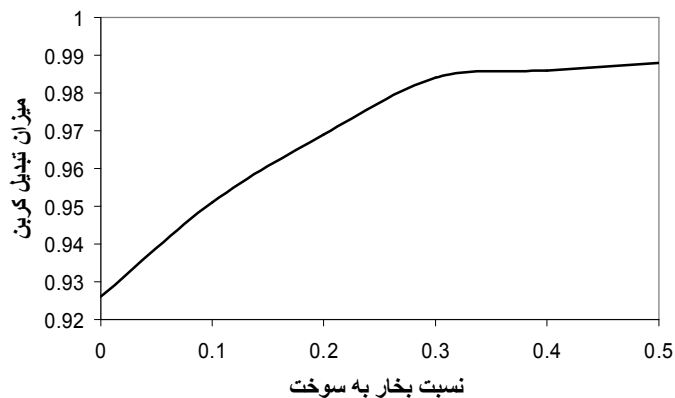
کاهش و مقدار CO_2 افزایش می یابد. سوختن گازهای H_2 و CO دلیل افزایش دما در شکل ۴ می باشد. نقاط داده شده در شکل ۵، مربوط به اطلاعات تجربی [۴] می باشد. در این شکل دیده می شود که مدل ریاضی، مقادیر آزمایشی را با تقریب خوبی پیش بینی می کند. برای بهبود تولید گازهای سنتز و رسیدن به بیشترین درصد تبدیل ذغال سنگ، نتایج ارائه شده در شکل های ۳ تا ۵ پیشنهاد می کنند که مقدار بهینه برای ورود اکسیژن بین ۰/۹ - ۰/۸ می باشد. شکل ۵ نشان می دهد که برای احتراق مستقیم ذغال سنگ مقدار نسبت $O_2/Fuel$ باید در حدود ۳،۵ باشد. در چنین شرایطی کل گازهای سنتز به طور کامل به CO_2 و H_2O تبدیل می شوند. به عبارت دیگر سوختن و احتراق ذغال سنگ به صورت کامل انجام می شود.

در شکل های ۶ تا ۸ اثر تغییر نسبت $steam/fuel$ بر عملکرد واحد گازسازی/احتراق نشان داده شده است. شکل ۶ نشان می دهد که درصد تبدیل ذغال سنگ برای مقادیر $steam/fuel$ حدود ۰،۳ و بیشتر به ۹۹٪ می رسد. در شکل ۷ نشان داده شده است که دمای خروجی از راکتور با افزایش نسبت $steam/fuel$ به صورت پیوسته کاهش می یابد. در نمودار شماره ۸ ملاحظه می شود که با افزایش مقدار بخار ورودی مقادیر CO_2 و CO افزایش یافته و مقدار H_2 کاهش می یابد. علیرغم آنکه افزایش میزان بخار سبب افزایش میزان تبدیل کربن می شود ولی برای ایجاد مقدار مناسب برای گازهای سنتز بازه بهینه ای وجود دارد. این به دلیل آن می باشد که واکنش ذغال سنگ با آب یک واکنش گرماگیر بوده لذا دمای محیط واکنش کم شده و

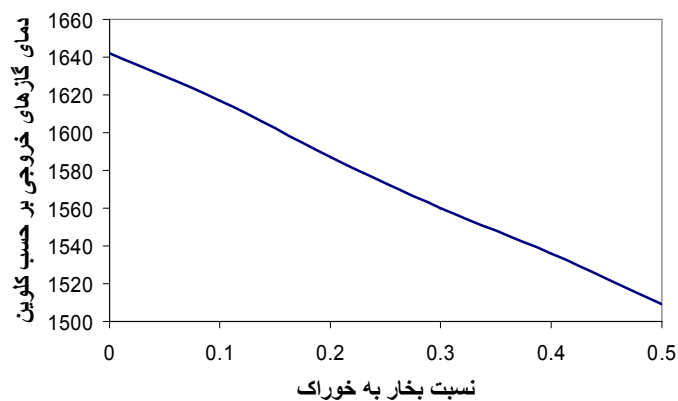
موجب کند شدن سرعت واکنش *gasification* می شود. بنابراین بازه بهینه برای نسبت بخار به سوخت بر طبق محاسبات انجام گرفته معادل $0.6 - 0.3$ می باشد. در چنین شرایطی بیشترین میزان گازهای سنتز با بیشترین ارزش حرارتی تولید خواهد شد. برای مقایسه با نتایج محاسباتی اطلاعات تجربی نیز در شکل های ۵ و ۸ نمایش داده شده اند. مهمترین پارامتر موثر در تعیین ابعاد راکتور گازسازی/احتراق اندازه ذرات ذغال سنگ می باشد. در نمودار شماره ۹ ملاحظه می شود که با افزایش میزان قطر ذرات ذغال سنگ طول راکتور بطور قابل ملاحظه ای افزایش پیدا می کند. دلیل این امر را می توان در کند شدن سرعت واکنش ها جستجو نمود. همانطور که در موازنه جرم شرح داده شد سرعت واکنش ها بر اساس عبارت زیر محاسبه می شوند :

$$\text{rate} = 1 / [(1/k_{\text{diff}}) + (1/k_s Y^2) + (1/k_{\text{dash}})(1/Y - 1)] (P_i - P_i^*)$$

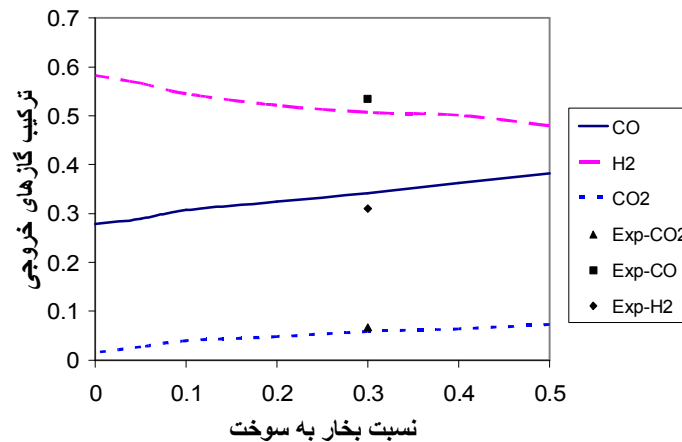
که در معادله فوق مقدار k_{diff} با قطر ذرات رابطه معکوس داشته بنابراین با افزایش قطر ذرات مقدار سرعت واکنش ها نیز کاهش می یابد. لذا از آنجاییکه طول راکتور با سرعت واکنش ها رابطه معکوس دارد با افزایش قطر ذرات طول راکتور نیز افزایش می یابد.



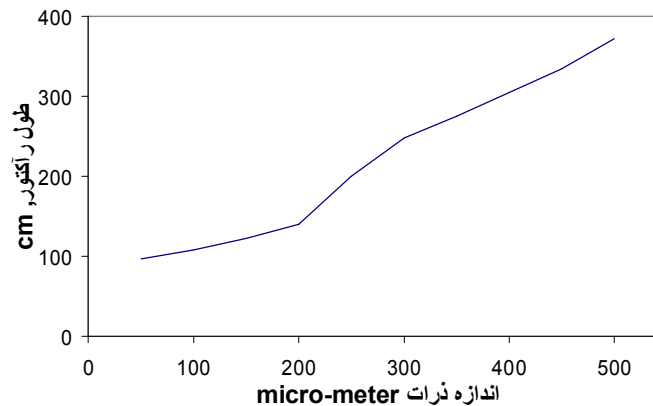
شکل ۶- درصد تبدیل کربن بر حسب تابعی از نسبت *Steam/Fuel*. نسبت *O2/Fuel* برابر با ۰.۷۷ می باشد.



شکل ۷- دمای گازهای خروجی بر حسب تابعی از نسبت *Steam/Fuel*. نسبت *O2/Fuel* برابر با ۰.۷۷ می باشد.



شکل ۸- ترکیب گازهای خروجی بر حسب تابعی از نسبت $Steam/Fuel$. نسبت $O_2/Fuel$ برابر 0.77 می باشد. نقاط داده شده در این شکل، مربوط به اطلاعات تجربی [۴] می باشد.



شکل ۹- طول مورد نیاز راکتور (جهت تبدیل ۹۹٪ ذغال سنگ) بر حسب تابعی از اندازه ذرات ذغال سنگ. شرایط دیگر عبارتند از: خوراک ورودی 126.11 g/s ، نسبت $O_2/Fuel$ برابر با 0.77 ، نسبت $H_2O/Fuel$ برابر با 0.3 .

۵- نتیجه گیری

یک مدل ریاضی برای کوره *Texaco down flow entrainment* ارائه شد که در آن از پسماند فرآیند قطران ذغال سنگ و دوغاب ذغال سنگ - آب به عنوان خوراک فرآیند استفاده شد. معادلات جرم و انرژی با در نظر گرفتن سینتیک واکنشهای گازسازی و احتراق مدل سازی شدند. حاصل این مدل سازی یک برنامه کامپیوتری در بستر نرم افزار *MATLAB* بوده که در این دانشگاه توسعه داده شد. نتایج بدست آمده از حل این برنامه با نتایج حاصل از عملکرد صنعتی یک واحد عملیاتی از شرکت *Texaco* مقایسه و تأیید شد. محاسبات نشان می دهند که برای احتراق مستقیم ذغال سنگ مقدار نسبت $O_2/Fuel$ باید در حدود ۳،۵ باشد. در چنین شرایطی کل گازهای سنتز به طور کامل به H_2O و CO_2 تبدیل می شوند. در شرایطی که بیشترین میزان گازهای سنتز با بیشترین ارزش حرارتی مورد نیاز باشد محدوده بهینه برای نسبت $Steam/Fuel$ بر طبق محاسبات معادل $0.6 - 0.3$ می باشد. در نهایت مدل سازی حاضر نشان داد که با افزایش میزان قطر ذرات ذغال سنگ طول مورد نیاز راکتور جهت رسیدن به ۹۹٪ تبدیل کربن بطور قابل ملاحظه ای افزایش خواهد یافت.

فهرست علائم

- a = سطح تماس بین جامد و گاز به ازای واحد حجم رآکتور (cm^2/cm^3)
 A_t = سطح مقطع رآکتور (cm^2)
 C_p = ظرفیت حرارتی فاز گاز و مایع بر حسب مورد. ($\text{cal}/(\text{gr} \cdot \text{K})$)
 d_p = قطر ذرات (cm)
 h_c = ضریب انتقال حرارت جابجایی میان گاز و جامد ($\text{cal}/(\text{cm}^2 \cdot \text{K})$)
 g = شتاب جاذبه (cm/s^2)
 H_{loss} = حرارت اتلاف شده از جداره رآکتور (cal/cm)
 K_g = هدایت حرارتی گاز ($\text{cal}/(\text{cm} \cdot \text{k})$)
 Γ_j = سرعت واکنش ز امین واکنش فاز جامد ($\text{g}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$)
 Γ_k = سرعت واکنش k امین واکنش فاز گازی ($\text{g}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s})$)
 T_g, T_s = به ترتیب دمای گاز و جامد (K)
 T_w = دمای دیواره رآکتور (K)
 v_g, v_s = به ترتیب سرعت گاز و جامد (cm/s)
 v_i = سرعت اولیه ذرات (cm/s)
 W_g, W_s = به ترتیب دبی گاز و جامد (g/s)
 ρ_s, ρ_g = به ترتیب جرم حجمی جامد و گاز (g/cm^3)
 μ = ویسکوزیته گاز (P)
 v_{ik} = ضریب استوکیومتری برای i مین جز گاز در k امین واکنش
 dt = زمان اقامت جامد به صورت دیفرانسیلی (s)
 dz = طول دیفرانسیلی رآکتور (cm)
 R = شعاع خارجی ذره به صورت واکنش نداده (cm)
 r_c = شعاع داخلی ذره به صورت واکنش نداده (cm)

مراجع

- Williams, A., Pourkashanian, M., Jones, J.M., "Combustion and Gasification of Coal," Taylor & Francis, New York, 2000.
- NIKSA, S. "Coal & Combustion Modeling," IEAPER / 31, IEA Coal Research, London, 1996.
- Cho Y.S., Joseph, B., "Heterogeneous Model for Moving Bed Coal Gasification Reactor," Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 20, pp. 314-318, 1981.
- Wen C.Y., Chaung, T.Z., "Entrainment Coal Gasification Modeling," Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 18, pp. 684-695, 1979.
- Zheng, L., Furinsky, E., "Comparison of Shell, Texaco, BGL and KRW gasifiers as part of IGCC plant computer simulations," Energy Conversion and Management, Vol. 46, pp. 1767-1779, 2005.
- Manna, M.D., Knutsonb, R.Z., Erjaveca, J., Jacobsen, J.P., "Modeling reaction kinetics of steam gasification for a transport gasifier," Fuel, Vol. 83, pp. 1643-1650, 2004.