

شبیه‌سازی و بهینه‌سازی تولید هیدروژن به کمک فرایند گازسازی زغال‌سنگ

مهرداد شمسی، حبیب آل ابراهیم دهکردی

دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران

محمد جواد آذر هوش*

گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه ارومیه، ارومیه، ایران

علیرضا آذر هوش

گروه مهندسی عمران، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه بجنورد، بجنورد، ایران

چکیده: در این مطالعه، تولید هیدروژن با استفاده از فرایند گازسازی زغال‌سنگ در راکتور بستر متحرک شبیه‌سازی و بهینه‌سازی شده است. در این راکتور زغال‌سنگ از بالا و ترکیب گاز اکسند و بخار آب از پایین به صورت متقابل با جامد در تماس قرار گرفته و گاز به دست آمده از واکنش از بالای راکتور خارج می‌شود. نتیجه‌های به دست آمده از شبیه‌سازی با مقدارهای تجربی مربوط مقایسه شده است و دارای خطای نسبی میانگین ۲/۴۷٪ بوده که نشانگر دقت قابل قبول نتیجه‌های شبیه‌سازی می‌باشد. در ادامه اثرهای دمای گاز ورودی، فشار راکتور، نسبت بخار آب به اکسیژن و زغال به اکسیژن بر روی بازده تولید هیدروژن بررسی شده است. گرچه آثاری در خصوص مدل‌سازی راکتور بستر متحرک گازسازی زغال به چاپ رسیده اما مطالعه‌های پارامتریک محدودی برای بررسی اثر متغیرهای گوناگون روی عملکرد راکتور با زغال پیتربورگ به عنوان خوراک در دسترس است. همچنین در این مطالعه شبیه‌سازی با دمای مجزا برای گاز و جامد برای تعیین دمای بیشینه دقیق فاز جامد، اعمال سینتیک تمام واکنش‌های ممکن، استفاده هم‌زمان از مدل‌های هسته کوچک شونده و حجمی در ناحیه‌های گوناگون راکتور و در نظر گرفتن توزیع اجزای گاز در مرحله‌ی پیرولیز، صورت گرفته که این امر برای یافتن هرچه دقیق‌تر ترکیب گاز فرآورده مفید می‌باشد. سرانجام، عملکرد راکتور برای تولید بیش‌ترین بازده تولید هیدروژن با استفاده از روش الگوریتم ازدحام ذره‌های بهینه‌سازی شده است. نتیجه‌های بهینه‌سازی نشان از افزایش ۲۴/۳٪ بازده تولید هیدروژن نسبت به حالت پایه دارد.

واژگان کلیدی: گازسازی زغال‌سنگ، راکتور بستر متحرک، شبیه‌سازی، بهینه‌سازی، الگوریتم ازدحام ذره‌ها.

KEYWORDS: Coal gasification; Moving-bed reactor; Simulation; Optimization; Particle Swarm Optimization.

مقدمه

فرایند گازسازی زغال سنگ، به دلیل نوسانات قیمت نفت خام و گاز طبیعی در سال‌های اخیر توجه کشورهای پیشرفته را به خود جلب نموده است [۱]. همچنین به دلیل تبدیل زغال سنگ به عنوان یک ماده ارزان به فراورده‌های با ارزش و متنوع در این فرایند، این تکنولوژی مدام در حال گسترش می‌باشد. فرایند گازسازی شامل یک سوخت کربنی مثل زغال و یک عامل گازسازی مثل بخار آب است که بیش‌تری فراورده گازی آن شامل هیدروژن و مونواکسیدکربن (گاز سنتز) می‌باشد. سه نوع راکتور بستر متحرک، بستر سیال و گاز برد برای این فرایند استفاده می‌شود که راکتور بستر متحرک لورگی^۱ از پیشرفته‌ترین این راکتورها است [۲].

در این راکتورها زغال سنگ از بالا و ترکیب اکسیژن (هوا) و بخار آب از پایین به صورت متقابل با جامد در تماس قرار گرفته و گاز سنتز به دست آمده از واکنش به همراه بخار آب اضافی از بالای راکتور خارج می‌شود. این راکتورها می‌توانند به صورت خاکستر خشک^۲ که در آن خاکستر باقی‌مانده از واکنش‌ها به حالت جامد از پایین راکتور خارج می‌شود و یا به صورت سرباره^۳ که در آن خاکستر به حالت مذاب خارج می‌شود، عمل کنند. شکل ۱-الف نمایی از راکتور واحد گازسازی زغال سنگ را نشان می‌دهد [۳]. مرحله‌هایی که یک دانه زغال از بالا تا پایین راکتور بستر متحرک گازسازی طی می‌کند، شامل خشک شدن زغال، پیرولیز، گازسازی و احتراق می‌باشد که در شکل ۱-ب به صورت شماتیک نشان داده شده است. خشک شدن اولین فرایند زغال در حال سقوط در جریان متقابل با گاز می‌باشد. در طول این فرایند گازهای گرم خروجی رطوبت درون زغال را خارج می‌کنند. مرحله دوم از بالای راکتور پیرولیز است که در آن مواد فرار به شکل گاز خارج می‌شوند. زمانی که زغال تا دماهای حدود ۳۵۰ الی ۴۵۰ درجه سلسیوس گرم شود از آن بخار آب، دی‌اکسیدکربن، گازهای قابل احتراق و تار (هیدروکربن‌های سنگین‌تر از C₆) خارج می‌شود [۴]. در ناحیه سوم واکنش‌های گرماگیر گازسازی زغال شامل واکنش بخار آب با کربن و واکنش دی‌اکسیدکربن با کربن انجام می‌شود. در این قسمت بیش‌ترین میزان مونواکسیدکربن و هیدروژن از واکنش بخار با زغال

تولید می‌شود و اکسیژنی در این بخش از راکتور وجود ندارد. قسمت آخر ناحیه احتراق و خاکستر شدن در پایین راکتور می‌باشد و اغلب شامل واکنش اکسایش کربن با اکسیژن است که گرمای لازم برای واکنش‌های گازسازی در مرحله سوم را تأمین می‌کند [۵].

مطالعه‌های استیگل^۴ و رمضان^۵ نشان داد که در صورت استفاده از تکنولوژی‌های پیشرفته روش تولید هیدروژن از روش گازسازی زغال سنگ می‌تواند حتی ارزان‌تر و اقتصادی‌تر از تولید هیدروژن با گاز طبیعی باشد [۶]. شوکو^۶ و همکاران نیز در یک پژوهش تکنولوژی‌های تولید هیدروژن از زغال و کاربرد آن را مورد بررسی قرار دادند و بیان داشتند که با استفاده از فرایندهای ترکیبی می‌توان تا ۴۷/۵ درصد بازده واحدهای تولید انرژی از گاز سنتز به دست آمده از گازسازی زغال را افزایش داد [۷]. کرمس^۷ و همکاران پژوهش‌های جدیدی برای تولید هیدروژن توسط فرایند گازسازی زغال با جذب دی‌اکسیدکربن مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها دریافتند که با استفاده از فشرده‌سازی گاز سنتز خام در یک گازساز با خوراک خشک و استفاده از دی‌اکسیدکربن به عنوان گاز حامل به جای نیتروژن می‌توان به هیدروژن بسیار خالص با حداقل خطا دست یافت [۸]. مدل‌های گوناگونی از راکتور بستر متحرک گازسازی زغال توسط پژوهشگران ثبت شده است اما بنا به عملکردهای متفاوت این دسته از راکتورها بسته به نوع زغال، شرایط عملیاتی و مشخصه‌ها گاز خوراک، شبیه‌سازی بر اساس مدل‌های به‌روز و دقیق‌تر برای کاربرد در بهینه‌سازی فرایند لازم است [۹-۱۱]. سینق^۸ و همکاران یک مدل ریاضی یک بعدی شامل مرحله‌های خشک شدن، پیرولیز، گازسازی و احتراق برای پیش‌بینی فرایند گازسازی زغال هندی با میزان خاکستر بالا توسعه دادند. نتیجه‌های مدل با داده‌های تجربی مطابقت خوبی داشت [۴]. آخالاس^۹ و همکاران، برای کاهش هزینه‌های عملیاتی تولید اکسیژن، جایگزینی مخلوط بخار آب و اکسیژن در فرایند گازسازی زغال سنگ با بخار آب را مورد بررسی قرار دادند [۱۲]. گاویند^{۱۰} و شاه^{۱۱} فرایند گازسازی زغال سنگ را با حل هم‌زمان معادله‌های مومنتوم، جرم و انرژی برای دو فاز گاز و مایع مدل‌سازی و شبیه‌سازی نمودند. نتیجه‌های به دست آمده از شبیه‌سازی مطابقت خوبی با نتیجه‌های تجربی داشت. نتیجه‌ها نشان داد که ترکیب گاز خروجی

(۱) Lurgi

(۳) Slagger

(۵) Ramezan

(۷) Cormos

(۹) Akhlas

(۱۱) Shah

(۲) Dry ash

(۴) Stiegel

(۶) Shoko

(۸) Singh

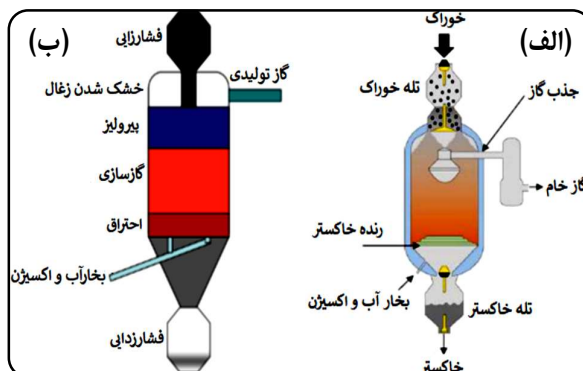
(۱۰) Govind

صورت متقابل با جامد در تماس قرار گرفته و گاز به دست آمده از واکنش از بالای راکتور خارج می‌شود. در ادامه اثرهای دمای گاز ورودی، فشار راکتور، نسبت بخار آب به اکسیژن و زغال به اکسیژن بر روی بازده تولید هیدروژن بررسی شد. گرچه آثاری در خصوص مدل‌سازی راکتور بستر متحرک گازسازی زغال به چاپ رسیده است اما مطالعه‌های پارامتریک محدودی برای بررسی اثر متغیرهای گوناگون روی عملکرد راکتور با زغال پیتزبورگ به عنوان خوراک در دسترس است. همچنین در این مطالعه شبیه‌سازی با دمای مجزا برای گاز و جامد برای تعیین دمای بیشینه دقیق فاز جامد، اعمال سینتیک تمام واکنش‌های ممکن، استفاده هم‌زمان از مدل‌های هسته کوچک‌شونده و حجمی در ناحیه‌های گوناگون راکتور و در نظر گرفتن توزیع اجزای گاز در مرحله پیرولیز، صورت گرفت که این امر برای یافتن هرچه دقیق‌تر ترکیب گاز فرآورده مفید می‌باشد. سرانجام با استفاده از مدل حاضر و الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذره‌ها^۵ در نرم افزار متلب^۶، راکتور برای تولید گاز هیدروژن با بالاترین بازده بهینه‌سازی شد.

مواد و روش‌ها

مدل‌سازی فرایند

در این مطالعه فرایند تولید گاز سنتز با استفاده از زغال سنگ درون یک راکتور بستر متحرک در حالت پایا با استفاده از مدل هسته کوچک‌شونده در واکنش احتراق و مدل حجمی برای سایر واکنش‌ها شبیه‌سازی شده است. در این مدل توزیع دمای گاز و جامد به صورت مجزا با نوشتن معادله‌های انرژی برای هر فاز در نظر گرفته شده است. سرانجام با حل دستگاه معادله‌های به دست آمده از بیلان جرم و انرژی ترکیب گاز خروجی در بالای راکتور و همچنین میزان تبدیل کربن در انتهای راکتور به دست خواهد آمد که می‌توان از این معادله‌ها برای بهینه‌سازی فرایند تولید گاز سنتز شامل هیدروژن و دیگر گازها بر مبنای تغییر متغیرهای عملیاتی دخیل در فرایند استفاده نمود. از جمله ابتدایی‌ترین مدل‌های واکنش‌های گاز-جامد مدل هسته عمل‌نکرده کوچک‌شونده است. در این مدل فرض می‌شود که واکنش از سطح خارجی جامد به درون آن پیش‌روی می‌کند. در حین پیشرفت واکنش یک لایه فرآورده متخلخل منسجم در اطراف هسته واکنش‌نده تشکیل شده به طوری که واکنش در لایه باریکی در حد



شکل ۱ - (الف) نمایی از راکتور واحد تبدیل به گاز زغال سنگ، (ب) شماتیک مرحله‌ها فرایند تبدیل به گاز

و درصد تبدیل زغال به سه پارامتر اساسی سرعت زغال ورودی، نسبت اکسیژن به زغال و نسبت بخار آب به زغال ورودی بستگی دارد که نسبت اکسیژن به زغال ورودی بیش‌ترین تاثیر را نسبت به سایر عامل‌ها دارد. مقدار بهینه نسبت اکسیژن به زغال ورودی بین ۰/۸ تا ۰/۹ برای حصول تبدیل ۹۸ تا ۹۹٪ تبدیل زغال سنگ به دست آمد و با توجه به این نسبت، نسبت بهینه بخار آب به زغال بین ۰/۳ تا ۰/۶ است [۱۳]. بیاجینی^۱ و همکاران نتیجه‌های گازسازی به دو صورت مستقیم و غیرمستقیم را با تغییر نسبت زغال سنگ به بخار آب و نسبت زغال سنگ به اکسیژن را مورد مطالعه قرار داده و بازده تولید هیدروژن را ارزیابی نموده و آن را مبنای کارهای بهینه‌سازی قرار دادند [۱۴]. زنگ^۲ و همکاران در سال ۲۰۱۲ میلادی شمایی از یک فرایند جدید با نام سی‌دی‌سی‌ال^۳ را مورد بررسی قرار دادند که اکسید آهن را برای گازسازی زغال به طور غیرمستقیم به کار می‌برد هیدروژن و دی‌اکسید کربن را تولید می‌کرد. آن‌ها از نرم‌افزار مهندسی شیمی اسپن پلاس^۴ برای شبیه‌سازی راکتورهای مورد مطالعه استفاده نمودند و شدت جریان‌های گوناگونی در این مبحث مورد آنالیز قرار دادند. نتیجه‌های مدل‌سازی نشان داد که فرایند سی‌دی‌سی‌ال از پتانسیل تبدیل زغال به هیدروژن با بازده گرمایی نزدیک به ۷۸ درصد برخوردار است در حالی که بیش از ۹۰ درصد دی‌اکسید کربن را می‌گیرد که این ۳۰ درصد بیش‌تر از یک فرایند معمولی گازسازی زغال است [۱۵].

در کار حاضر راکتور بستر متحرک گازسازی لورگی با زغال پیتزبورگ به عنوان خوراک، شبیه‌سازی شد. در این راکتورها زغال سنگ از بالا و ترکیب گاز اکسند و بخار آب از پایین به

(۱) Biagini

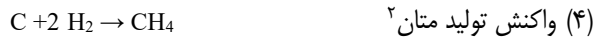
(۳) CDCL

(۵) Particle Swarm Optimization (PSO)

(۲) Zeng

(۴) Aspen plus

(۶) MATLAB R2018b



در واکنش اول λ برای ذره‌های با قطر بزرگ‌تر از ۱ میلی‌متر، برابر ۱ می‌باشد که به معنای احتراق کامل است. از آن‌جا که در مطالعه حاضر اندازه ذره‌های زغال حدود ۲ سانتی‌متر است، λ برابر ۱ در نظر گرفته می‌شود. معادله حالت برای این واکنش‌ها به صورت زیر است [۲۲، ۲۱]:

$$Rate = \frac{P_i - P_i^*}{\frac{1}{k_{film}} + \frac{1}{k_s Y^2} + \frac{1}{k_{ash}}} \quad (۶)$$

که در این معادله حالت، $Rate$ نرخ انتقال جرم (مولکول) بر حسب $P_i \text{ mole.cm}^3/s$ فشار جزئی ماده i بر حسب اتمسفر و P_i^* فشار تعادل ذره i بر حسب اتمسفر، k_{film} ضریب نفوذ i در فیلم گاز بر حسب $\text{mole.cm}^3/\text{atm.s}$ و k_{ash} ضریب نفوذ i در لایه خاکستر بر حسب $\text{mole.cm}^3/\text{atm.s}$ و k_s ثابت واکنش بر حسب $\text{mole.cm}^3/\text{atm.s}$ و Y نسبت شعاع هسته واکنش نداده (بر اساس مدل هسته کوچک شونده) به شعاع اولیه ذره می‌باشند.

واکنش احتراق

واکنش سوختن کربن با اکسیژن به صورت ناهمگن انجام می‌شود و توسط مدل هسته عمل‌نکرده کوچک‌شونده برای تعیین سرعت واکنش کل بیان می‌شود. همان‌گونه که گفته شد به دلیل سرعت بالای واکنش شیمیایی احتراق مرحله‌های نفوذ اکسیژن در فیلم گاز و لایه خاکستر کنترل‌کننده می‌باشند. بنابراین از مقاومت واکنش شیمیایی صرف‌نظر می‌شود [۲۱]:

$$R_1 = \frac{P_{O_2}}{\frac{1}{k_{film}} + \frac{1}{k_{ash}}} \quad (۷)$$

که در این معادله R_1 سرعت مولی واکنش احتراق در حجم راکتور بر حسب مول بر سانتی‌متر مکعب بر ثانیه $(\text{mol/cm}^3.s)$ ، P_{O_2} فشار جزئی اکسیژن بر حسب اتمسفر، k_{film} ضریب نفوذ اکسیژن در فیلم گاز بر حسب مول بر اتمسفر بر سانتی‌متر مکعب بر ثانیه $(\text{mol/atm.cm}^3.s)$ و k_{ash} ضریب نفوذ اکسیژن در لایه خاکستر بر

واسط دو ناحیه انجام می‌شود. اما در مدل حجمی اجزاء گاز درون زغال نفوذ کرده و واکنش علاوه بر لایه باریکی روی سطح مشترک دو فاز، در تمام حجم ماده انجام می‌شود [۱۷، ۱۶]. فرضیات به کار رفته برای ساده‌سازی مدل به شرح ذیل می‌باشد:

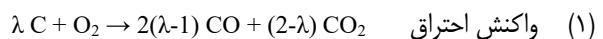
- جریان فاز گاز و جامد هر دو به صورت پیستونی در نظر گرفته می‌شوند. با محاسبه اعداد رینولدز ($Re = 51816$) و اشمیت ($Sc = 1210$) و بزرگ بودن عدد پکلت ($Pe > 50$) مشخص شد که جریان گاز به صورت پیستونی می‌باشد [۵] و همچنین با فرض یکسان بودن اندازه ذره‌های زغال و پیستونی بودن جریان گاز، جریان فاز جامد را نیز می‌توان پیستونی فرض نمود؛ این با محاسبه عدد پرانتل نیز برای انتقال گرما محوری نیز مفروض است [۱۸].
- از اثر کناره‌ها و گرمای به‌دست آمده از اصطکاک سیال صرف‌نظر شد [۲۰، ۱۹].

- مدل در حالت پایا نسبت به زمان می‌باشد [۱۸].
- از افت فشار در طول راکتور به دلیل ناچیز بودن صرف‌نظر شد [۱۸].
- قطر ذره‌ها تقریباً ثابت می‌ماند. در نتیجه تخلخل بستر هم ثابت در نظر گرفته شد [۲۰، ۱۹].
- توزیع دما و غلظت اجزای گاز در امتداد شعاع یکنواخت و ثابت می‌باشد [۵].
- دمای دیواره راکتور با فرض جریان بالایی از آب به عنوان خنک‌کننده، ثابت در نظر گرفته شد [۲۱].

- با توجه به مقدار عدد بایوت ($Bi = 0.25 < 1$) توزیع دما درون ذره‌های زغال یکسان فرض شد [۲۰، ۱۹].
- از مقاومت انتقال جرم در فاز جامد صرف‌نظر شد [۲۰، ۱۹].
- با استفاده از تشابه رینولدز-کالبرن و با نظر به بالا بودن عدد شروود روی هر ذره ($Re_p = 335$ ، $Sh \gg 2$ و $Sc_p = 1210$) و جریان مغشوش روی ذره‌های کروی، از گرادیان غلظت میان سطح ذره و توده گاز نیز صرف‌نظر شد [۵].

سینتیک واکنش‌ها

در فرایند گازسازی زغال واکنش‌های گوناگونی بین جامد و اجزای گازی صورت می‌گیرد که عبارت هستند از [۱۸]:



(۱) Boudouard reaction

(۳) Water-gas shift reaction

(۲) Methanation

$$P_{H_2O}^* = \frac{P_{H_2} P_{CO}}{e^{\frac{17.29 - 16330}{T_s}}} \quad (12)$$

که در این معادله فشار جزئی هیدروژن بر حسب اتمسفر، P_{CO} فشار جزئی مونواکسیدکربن بر حسب اتمسفر و T_s دمای فاز جامد (زغال) بر حسب کلوین می‌باشند.

واکنش بودوارد

واکنش بودوارد (واکنش کربن-دی‌اکسیدکربن)، از نظر سینتیک مشابه واکنش تبدیل گاز با بخار آب می‌باشد و تنها از لحاظ استوکیومتری متفاوت است. ون^۱ و تن^۲، سرعت این واکنش را بر اساس معادله جذب لانگمویر^۳ و نسبت به دی‌اکسیدکربن از درجه اول مطرح نمودند که در فشار جزئی پایین دی‌اکسیدکربن و دمای زیر ۲۳۷۰ درجه فارنهایت صادق است [۱۲].

$$R_3 = k_3(P_{CO_2} - P_{CO_2}^*)[C] \quad (13)$$

که در این معادله R_3 سرعت مولی واکنش بودوارد بر حسب مول بر سانتی‌متر مکعب بر ثانیه، $[C]$ غلظت مولار کربن در داخل راکتور بر حسب مول بر سانتی‌متر مکعب، k_3 ثابت واکنش بودوارد بر حسب بر اتمسفر بر ثانیه، P_{CO_2} فشار جزئی دی‌اکسیدکربن بر حسب اتمسفر و $P_{CO_2}^*$ فشار تعادلی دی‌اکسیدکربن بر حسب اتمسفر می‌باشند که فشار تعادلی دی‌اکسیدکربن در معادله (۱۱) از معادله زیر به‌دست می‌آید:

$$P_{CO_2}^* = \frac{P_{CO}^2}{e^{\frac{20.92 - 20280}{T_s}}} \quad (14)$$

که در این معادله P_{CO} فشار جزئی مونواکسیدکربن بر حسب اتمسفر و T_s دمای فاز جامد (زغال) بر حسب کلوین می‌باشند.

واکنش تولید متان

واکنش تولید متان گرمازا می‌باشد و زمانی که فشار جزئی هیدروژن و دما پایین باشند خیلی آهسته است، اما در فشار بالا و دمای بالای ۱۳۰۰ درجه فارنهایت سرعت واکنش محسوس می‌باشد. معادله تجربی زیر برای محاسبه سرعت این واکنش توسط ون و هابلر^۴ پیشنهاد شده است [۱۲].

$$R_4 = e^{\left(-7.087 - \frac{8078}{T_s}\right)} (P_{H_2} - P_{H_2}^*)[C] \quad (15)$$

که در این معادله R_4 سرعت مولی واکنش تولید متان بر حسب مول

حسب مول بر اتمسفر بر سانتی‌متر مکعب بر ثانیه ($mol/atm.cm^3.s$) می‌باشند. معادله فوق در دمای بالای ۱۷۰۰ درجه فارنهایت صادق است و می‌توان از مقاومت واکنش شیمیایی صرف‌نظر کرد. ضریب‌ها نفوذ در فیلم و خاکستر به ترتیب از معادله‌های (۷) و (۸) به‌دست می‌آیند [۱۸].

$$k_{film} = 0.292 \times 4.26 \times \frac{(T/1800)^{1.75}}{d_p T} \quad (8)$$

$$k_{ash} = k_{film} \varepsilon_{ash}^{2.5} \frac{\gamma}{1 - \gamma} \quad (9)$$

که در معادله‌های فوق، γ نسبت شعاع هسته عمل نکرده به شعاع اولیه ذره، T میانگین دمای گاز و جامد بر حسب کلوین، d_p قطر زغال بر حسب سانتی‌متر و ε_{ash} تخلخل زغال می‌باشند. همچنین تغییرهای شعاع هسته عمل نکرده از روش معادله زیر به‌دست می‌آید:

$$r = r_0(1 - X)^{\frac{1}{3}} \quad (10)$$

که در این معادله r شعاع هسته عمل نکرده بر حسب سانتی‌متر، r_0 شعاع اولیه ذره بر حسب سانتی‌متر و X جز تبدیل زغال می‌باشد.

واکنش کربن-بخار آب

واکنش گازسازی زغال با بخار آب نسبت به دیگر واکنش‌ها آهسته می‌باشد و از مدل واکنش حجمی پیروی می‌کند. این واکنش گرماگیر می‌باشد و دمای بیشینه را درون راکتور کنترل می‌کند. برای واکنش کربن-بخار آب معادله زیر صادق است:

$$R_2 = k_2(P_{H_2O} - P_{H_2O}^*)[C] \quad (11)$$

که در این معادله R_2 سرعت مولی واکنش کربن-بخار آب بر حسب مول بر سانتی‌متر مکعب بر ثانیه، $[C]$ غلظت مولار کربن در داخل راکتور بر حسب مول بر سانتی‌متر مکعب، k_2 ثابت واکنش کربن-بخار آب بر حسب بر اتمسفر بر ثانیه، P_{H_2O} فشار جزئی بخار آب بر حسب اتمسفر و $P_{H_2O}^*$ فشار تعادلی بخار آب بر حسب اتمسفر می‌باشند. ثابت سرعت واکنش از معادله آرنیوس پیروی می‌کند و به نوع زغال بستگی دارد. معادله فوق در دماهای پایین‌تر از ۲۲۰۰ درجه فارنهایت برقرار می‌باشد زیرا با افزایش دما ثابت سرعت بالا می‌رود و در نتیجه محدودکننده سرعت از واکنش شیمیایی به نفوذ مولکولی تبدیل می‌شود. فشار تعادلی بخار آب در معادله (۹) از معادله زیر به‌دست می‌آید:

(۱) Wen

(۳) Langmuir

(۲) Tone

(۴) Huebler

$$\frac{dF_{H_2O}}{dz} = -R_2 - R_5 \quad (21)$$

$$\frac{dF_{CO_2}}{dz} = \frac{2-\lambda}{\lambda} R_1 - R_3 + R_5 \quad (22)$$

$$\frac{dF_{O_2}}{dz} = -\frac{1}{\lambda} R_1 \quad (23)$$

$$\frac{dF_{N_2}}{dz} = 0 \quad (24)$$

$$\frac{dF_{CH_4}}{dz} = R_4 \quad (25)$$

در تمامی معادله‌های فوق، F شار مولی بر حسب مول بر مترمربع بر ثانیه، z طول راکتور بر حسب متر و R سرعت تولید کربن در واکنش مربوطه بر واحد حجم راکتور بر حسب مول بر سانتی‌متر مکعب بر ثانیه است. برای فاز جامد هم به همین ترتیب عمل می‌شود، فقط در معادله انتقال جرم جامد فلاکس (یا سرعت) فاز جامد منفی می‌باشد و این به دلیل سقوط جامد به سمت پایین (در جهت منفی محور مختصات) می‌باشد. بنابراین معادله دیفرانسیل تغییرات شار مولی کربن بر اساس طول راکتور برابر است با:

$$\frac{dF_C}{dz} = -R_1 - R_2 - R_3 - R_4 \quad (26)$$

موازنه گرما

اگر دمای گاز و جامد به صورت مجزا در نظر گرفته شود، انتقال گرما بین گاز و جامد و همچنین بین گاز و دیواره راکتور با مکانیزم جابه‌جایی و بین لایه‌های جامد با مکانیزم تابشی صورت می‌گیرد. بنابراین برای فاز جامد با فرض این که دمای جامد بیش‌تر از دمای گاز و برای جریان رو به بالا باشد، معادله به صورت زیر نوشته می‌شود [۲۴، ۲۳]:

$$\left(C_{ps} F_s + \frac{4\sigma}{2} T_s^3 \right) \frac{dT_s}{dz} = -h_p n_p A_p (T_s - T_g) - \sum_{i=1}^4 \Delta H_i R_i(T_s) - \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^N a_{ij} R_i [H_j(T_s) - H_j(T_g)] \quad (27)$$

همچنین معادله انتقال گرما فاز گاز به صورت زیر به دست می‌آید [۲۴، ۲۳]:

بر سانتی‌مترمکعب بر ثانیه، $[C]$ غلظت مولار کربن در داخل راکتور بر حسب مول بر سانتی‌مترمکعب، P_{H_2} فشار جزئی هیدروژن بر حسب اتمسفر، $P_{H_2O}^*$ فشار تعادلی هیدروژن بر حسب اتمسفر و T_s دمای فاز جامد (زغال) بر حسب کلوین می‌باشند. در معادله فوق، فشار تعادلی هیدروژن از معادله زیر به دست می‌آید:

$$P_{H_2}^* = \left(\frac{P_{CH_4}}{e^{-13.43 + \frac{10100}{T_s}}} \right)^{0.5} \quad (16)$$

که در این معادله P_{CH_4} فشار جزئی متان بر حسب اتمسفر می‌باشد.

واکنش تغییر آب-گاز

واکنش تغییر آب-گاز، گرمازا و در حضور کاتالیست بسیار سریع می‌باشد. اغلب راکتورهای این واکنش از کاتالیست بر پایه آهن یا کروم برای تولید هیدروژن از مونواکسید کربن و بخار آب استفاده می‌کنند. سینتی و سراف^۱ یک معادله سرعت مرتبه اول با احتساب اثر دما، فشار و عمر کاتالیست و همچنین غلظت سولفید هیدروژن در گاز واکنش دهنده روی کاتالیست پیشنهاد دادند (معادله (۱۶)). در این معادله با در نظر گرفتن یک فاکتور تصحیح اثرهای مواد مسموم‌کننده^۲ کاتالیست و کلوخه شدن^۳ کاتالیست را در نظر گرفتند که فعالیت خاکستر زغال را به عنوان یک کاتالیست نشان می‌دهد.

$$R_5 = 2.87 \times 10^5 b e^{-\frac{2776}{RT}} \left(X_{CO} - \frac{X_{CO_2} X_{H_2}}{X_{H_2O} K_{WGS}} \right) X_{ash} \rho_c (1 - \varepsilon_{bed}) P^{(0.5 - \frac{P}{250})} e^{(-8.91 + \frac{5553}{T})} \quad (17)$$

در معادله فوق b ، فاکتور تصحیح مربوط به فعالیت خاکستر نسبت به کاتالیست کروم بر پایه آهن می‌باشد که به نوع زغال بستگی دارد، ε_{bed} بیانگر تخلخل بستر و K_{WGS} ثابت تعادل واکنش می‌باشد که به صورت زیر بیان می‌شود:

$$K_{WGS} = e^{(-3.698 + \frac{7234}{1.8T})} \quad (18)$$

موازنه جرم

معادله‌های موازنه جرم برای اجزای گوناگون در فاز گاز به صورت زیر است:

$$\frac{dF_{H_2}}{dz} = -R_2 + 2R_4 + R_5 \quad (19)$$

$$\frac{dF_{CO}}{dz} = \frac{2(\lambda - 1)}{\lambda} R_1 + R_2 + 2R_3 - R_5 \quad (20)$$

(۱) Saraf

(۳) Sintering

(۲) Poisoner

جدول ۱ - معادله‌های مربوط به سایر پارامترهای عملیاتی محاسبه شده در شبیه‌سازی [۱۹-۲۱]

واحد در محاسبه‌ها	معادله	پارامتر
cal/cm.s.k	$h_p = \frac{2.06 C_{pg} F_g}{\epsilon_{bed} Re^{0.575} Pr^{\frac{-2}{3}}}$	ضریب انتقال گرما گاز-جامد
cal/mol.k	$C_{pg} = \sum_{i=1}^7 X_i C_{pi}$	ظرفیت گرمایی ویژه مولی گازی
cal/mol.k	$C_{Ps} = X_C C_{P,C} + X_{ash} C_{P,ash}$	ظرفیت گرمایی ویژه مولی جامد
g/cm.s (POISE)	$\mu_g = \sum_{i=1}^7 X_i \mu_i$	ویسکوزیته توده گاز
cal/cm.s.k	$K_g = \sum_{i=1}^7 X_i K_i$	ضریب هدایت گرمایی توده گاز
g/mol	$MW_g = \sum_{i=1}^7 X_i MW_i$	جرم مولکولی توده گاز
-	$Re = \frac{\rho U d_p}{\mu}$	عدد بدون بعد رینولدز
-	$Pr = \frac{C \mu_g}{K}$	عدد بدون بعد پرانتل

کلوین، ΔH_i گرمای واکنش i ام در دمای استاندارد بر حسب کیلوژول بر مول، ضریب استوکیومتری واکنش گرگازی جزء j در واکنش i ام، $H_j(T_s)$ آنتالپی مواد در دمای فاز جامد بر حسب کیلوژول بر مول، N تعداد اجزای موجود در مخلوط و $H_j(T_g)$ آنتالپی مواد در دمای فاز گاز بر حسب کیلوژول بر مول می‌باشند.

محاسبه سایر پارامترهای عملیاتی

سایر معادله‌ها به کار رفته در این مطالعه برای محاسبه پارامترهای عملیاتی در جدول ۱ آورده شده‌اند.

روش حل معادله‌ها و شرایط مرزی

موازنه جرم و انرژی در طول راکتور بستر متحرک گازسازی زغال سنگ منجر به ایجاد دسته‌ای از معادله‌های دیفرانسیل معمولی با دو سری شرایط مرزی می‌شود. روش رانگ-کاتا^۱ برای حل مسائل مقدار اولیه به کار می‌رود و می‌توان با مشخص کردن تمام کمیات در یک طرف از این روش برای حل معادله‌ها استفاده نمود. در این کار هم به دلیل آن که تمام شرایط در یک طرف راکتور

$$\frac{dT_g}{dz} = \frac{1}{C_{pg} F_g} \left[h_p n_p A_p (T_s - T_g) - \Delta H_5 R_5 (T_g) + \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^N a_{ij} R_i [H_j(T_s) - H_j(T_g)] - hS(T_g - T_w) \right] \quad (28)$$

در معادله‌های فوق، C_{ps} ظرفیت گرمایی ویژه مولی جامد بر حسب کیلوژول بر کیلوگرم بر کلوین، F_s شار مولی جامد بر حسب مول بر مترمربع بر ثانیه، σ ثابت استفان-بولتزمن^۲، e ضریب گسیل جامد، T_s دمای فاز جامد بر حسب کلوین، z طول راکتور بر حسب متر، h_p ضریب انتقال گرما جابه‌جایی بین جامد و گاز بر حسب کیلوژول بر مترمربع بر ثانیه بر کلوین، h ضریب انتقال گرما جابه‌جایی بین گاز و دیواره بر حسب کیلوژول بر مترمربع بر ثانیه بر کلوین، n_p تعداد دانه (کره) جامد در واحد حجم راکتور، A_p سطح هر ذره جامد بر حسب متر مربع، T_g دمای فاز گاز بر حسب

(۱) Stefan-Boltzman

(۲) Rung-Kutta method

جدول ۱ - شرایط عملیاتی راکتور واحد وستفیلد با زغال پیتزبورگ [۲۱]

پارامتر	مقدار	پارامتر	مقدار
دمای جامد ورودی	۲۹۸ K	دمای دیواره راکتور	۶۴۴ K
شدت جریان جامد ورودی	۳۶۵۵ kg/h	فشار راکتور	۲۳/۸ atm
اندازه دانه زغال خوراک	۲ cm	شدت جریان بخار آب	۱۱۸۵۹ kg/h
ضریب تخلخل بستر	۰/۴	شدت جریان اکسیژن	۲۲۷۰ kg/h
قطر بستر	۳/۰۵ m	دمای گاز ورودی	۶۴۴ K
ارتفاع بستر	۳/۰۵ m	کسر مولی اکسیژن در هوا	۰/۹۴

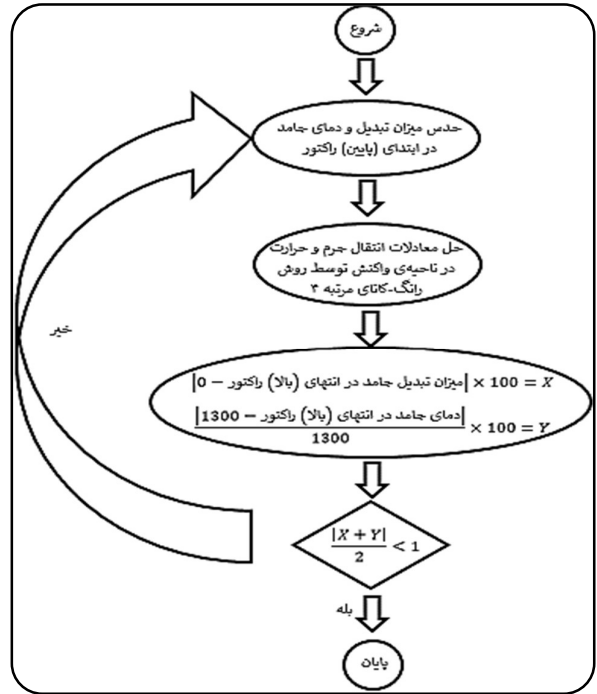
شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفته است، در جدول ۱ آورده شده است. خوراک راکتور زغال پیتزبورگ می‌باشد که نتیجه‌های آنالیز آن در جدول ۲ آمده است [۲۱]. عناصر نام برده شده در آنالیز دقیق زغال به شکل تک‌اتمی می‌باشند (غیر از آب و گوگرد که ترکیبی از اتم‌های گوناگون هستند).

الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذره‌ها

الگوریتم ازدحام ذره‌ها یک الگوریتم جستجوی جمعی است که از روی رفتار اجتماعی دسته‌های پرندگان مدل شده‌است. در ابتدا این الگوریتم به منظور کشف الگوهای حاکم بر پرواز هم‌زمان پرندگان و تغییر ناگهانی مسیر آن‌ها و تغییر شکل بهینه دسته به کار گرفته شد. در الگوریتم ازدحام ذره‌ها، ذره‌ها در فضای جستجو جاری می‌شوند. تغییر مکان ذره‌ها در فضای جستجو تحت تأثیر تجربه و دانش خودشان و همسایگان‌شان است؛ بنابراین موقعیت دیگر توده ذره‌ها روی چگونگی جستجوی یک ذره اثر می‌گذارد. نتیجه مدل‌سازی این رفتار اجتماعی فرایند جستجویی است که ذره‌ها به سمت ناحیه‌های موفق میل می‌کنند. ذره‌ها از یکدیگر می‌آموزند و بر مبنای دانش به‌دست آمده به سمت بهترین همسایگان خود می‌روند. اساس کار این الگوریتم بهینه‌سازی بر این اصل استوار است که در هر لحظه هر ذره مکان خود را در فضای جستجو با توجه به بهترین مکانی که تاکنون در آن قرار گرفته‌است و بهترین مکانی که در کل همسایگی‌اش وجود دارد، تنظیم می‌کند. شکل ۳ فلوجارت الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذره‌ها را نشان می‌دهد [۲۵]:

فلوجارت فوق از مرحله‌ها زیر تعیین شده است:

۱- انتخاب تعداد ذره‌های اولیه: تعداد جمعیت اولیه با توجه به مسئله تعیین می‌شود. تعداد ذره‌های زیاد می‌تواند موجب افزایش زمان



شکل ۲ - فلوجارت مرحله‌های حدس و خطا

معلوم نیست، با حدس اولیه مقدرهای مجهول در ابتدای (پایین) راکتور و استفاده از روش تیراندازی^۱ معادله‌ها با شرایط مرزی مجزا، به مسئله با مقدرهای اولیه تبدیل و قابل حل با روش رنگ-کاتای مرتبه چهار می‌شود. با در نظر گرفتن پایین راکتور به عنوان مبدأ مختصات و با توجه به این که گاز و بخار آب از پایین و زغال سنگ از بالای راکتور وارد می‌شوند، می‌توان مسئله را از پایین راکتور با داشتن ترکیب و دمای گاز ورودی به عنوان مقدرهای اولیه حل نمود؛ در این صورت میزان تبدیل و دمای جامد خروجی در پایین مجهول می‌باشند که باید آن‌ها را حدس و مسئله را با سعی و خطا حل نمود و در هر مرحله نتیجه‌های به‌دست آمده برای میزان تبدیل و دمای جامد را با مقدرهای واقعی این پارامترها در بالای راکتور مقایسه نمود و با توجه به معیار مناسب برای خطای محاسبه‌های این روند را ادامه داد تا مقدرهای مذکور به صورت حدودی بر شرایط بالای راکتور منطبق شوند. شکل ۲ فلوجارت مرحله‌های حدس و خطا را نشان می‌دهد.

داده‌های تجربی

شرایط عملیاتی، مشخصه‌های خوراک و گاز ورودی و همچنین مشخصه‌های راکتور واحد وستفیلد اسکاتلند که در این مطالعه برای

(۱) Shooting method

جدول ۲ - آنالیز تقریبی و دقیق زغال پیتزبورگ [۲۱]

آنالیز تقریبی (درصد وزنی)		رطوبت		کربن ثابت		مواد فرار		خاکستر	
۴/۵۸		۴/۵۸		۵۰/۳۱		۳۷/۳۷		۷/۷۴	
آنالیز دقیق (درصد وزنی)		اکسیژن		نیتروژن		هیدروژن		گوگرد	
۴/۵		۱/۴		۵/۰		۲/۵		۴/۵۸	
		کربن		آب		کربن		خاکستر	
		۷۴/۲		۴/۵۸		۲/۵		۷/۷۴	

در تمامی تکرارها) و بهترین موقعیت در بین کل ذره‌ها در تکرارهای گوناگون (بالاترین جزء مولی هیدروژن بین تمام ذره‌ها در تمامی تکرارها) تعیین می‌شود. در تکرار اول، موقعیت هر ذره به عنوان بهترین موقعیت برای آن ذره در نظر گرفته می‌شود [۲۵].

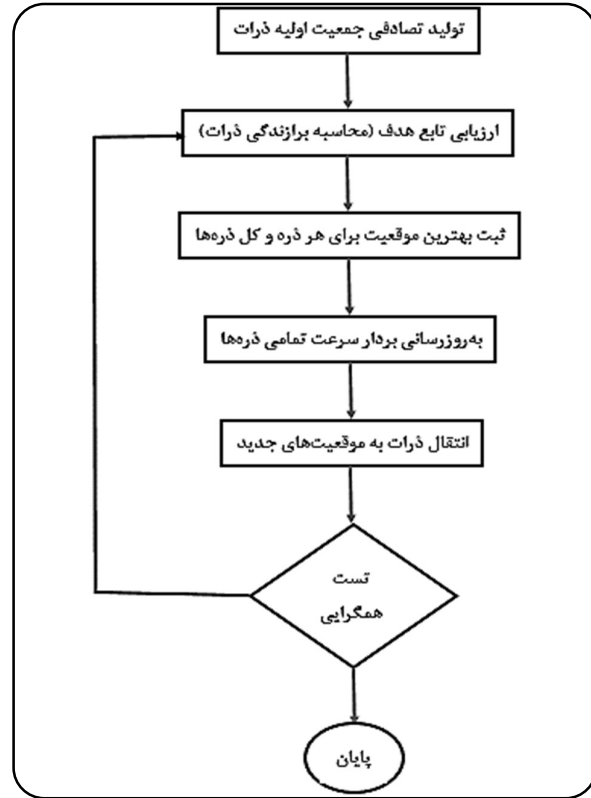
۴- به روزرسانی بردار سرعت تمامی ذره‌ها: در این مرحله بردارهای سرعت تمامی ذره‌ها به کمک معادله زیر به روزرسانی می‌شود [۲۵]:

$$V_i(t) = w \times V_i(t-1) + c_1 \times rand_1 \times (P_{i,best} - X_i(t-1)) + c_2 \times rand_2 \times (P_{g,best} - X_i(t-1)) \quad (29)$$

در معادله فوق، t شماره تکرار، V_i بردار سرعت ذره i ضریب اینرسی، c_1 ضریب یادگیری شخصی، c_2 ضریب یادگیری جمعی، $rand$ عدد تصادفی بین صفر و یک، X_i مکان ذره i بهترین $P_{i,best}$ موقعیت ذره i و $P_{g,best}$ بهترین موقعیت در کل ذره‌ها است. در این مطالعه، ضریب‌های یادگیری c_1 و c_2 برابر ۲ در نظر گرفته شده‌اند. همچنین ضریب اینرسی w به صورت تابع نزولی در تکرارهای متفاوت در نظر گرفته شده است. افزایش w باعث تقویت جست‌وجو (توانایی تولید پاسخ‌های جدید و جست‌وجوی تصادفی) می‌شود و کاهش آن به نفع بهره‌برداری^۲ (توانایی پروراندن پاسخ‌های فعلی و جست‌وجوی محلی) است و معمولاً الگوریتم‌های بهینه‌سازی به گونه‌ای پیاده‌سازی می‌گردند که در ابتدای کار نرخ جست‌وجو بالا باشد و با افزایش تکرار از نرخ جست‌وجو کاسته و به نرخ بهره‌برداری اضافه شود. در نتیجه مقتضی است هنگام پیاده‌سازی به این مهم توجه شود و مقدارهای w در ابتدای کار بالا انتخاب شده و به تدریج کاهش یابد. برای این کار از معادله زیر استفاده می‌شود [۱۷]:

$$w = w_0 \times w_{damp} \quad (30)$$

که در آن w_0 مقدار ضریب اینرسی در تکرار اول و w_{damp} فاکتور کاهش ضریب اینرسی در تکرارهای گوناگون است و به ترتیب برابر ۱ و ۰/۹۵ در نظر گرفته شده‌اند. به عبارت دیگر، در هر تکرار w_{damp} در مقدار پیشین w ضرب شده و باعث کاهش آن می‌شود. به عنوان



شکل ۳ - فلوچارت الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذره‌ها

اجرای برنامه و تعداد ذره‌های کم می‌تواند موجب گیرافتادن در جواب‌های بهینه محلی شود [۲۶]. در این مطالعه، ۵۰ ذره به عنوان ذره‌های اولیه به صورت تصادفی انتخاب شده‌اند.

۲- ارزیابی تابع هدف ذره‌ها: در این مرحله باید هر یک از ذره‌ها را که نشان‌دهنده یک حل برای مسئله مورد بررسی است، ارزیابی نمود [۲۵]. برای ارزیابی ذره‌ها، کد مربوط به شبیه‌سازی راکتور اجرا شده و جزء مولی هیدروژن محاسبه می‌شود.

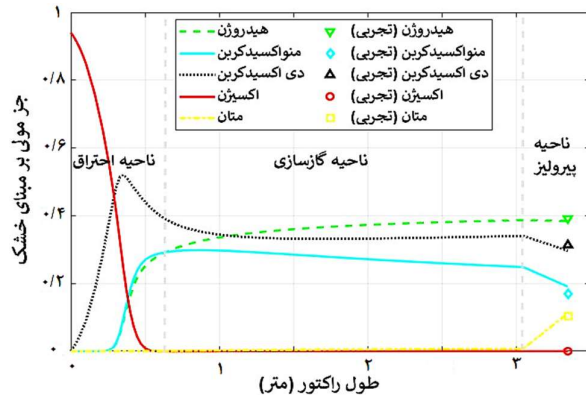
۳- ثبت بهترین موقعیت برای هر ذره ($P_{i,best}$) و بهترین موقعیت در بین کل ذره‌ها ($P_{g,best}$): در این مرحله بهترین موقعیت هر ذره در تکرارهای گوناگون (بالاترین جزء مولی هیدروژن برای هر ذره

(۱) Exploration

(۲) Exploitation

جدول ۳ - مقایسه نتیجه‌های به‌دست آمده از شبیه‌سازی و داده‌های تجربی [۲۱]

خطای نسبی (%)	نتیجه‌ها شبیه‌سازی	داده‌های تجربی	پارامترهای خروجی
۲/۶۴	۳۴۱	۳۵۰	شدت جریان گاز فراورده بر مبنای خشک (kgmol/h)
۳/۰۳	۱۷/۳۱	۱۶/۸۰	CO
۲/۳۰	۳۰/۵۸	۳۱/۳۰	CO ₂
۰/۹۴	۳۹/۵۷	۳۹/۲۰	H ₂
۵/۷۲	۱۰/۸۹	۱۰/۳۰	CH ₄
۱/۲۵	۱/۶۲	۱/۶۰	N ₂
۳/۵۳	۵۵۸	۵۳۹	شدت جریان بخار آب خروجی (kgmol/h)
۰/۵۰	۰/۹۸۴	۰/۹۸۹	میزان تبدیل جامد
-	۱۲۷۸	-	دمای بیشینه (K)
۳/۷۰	۹۵۴	۹۲۰	دمای گاز خروجی (K)
۱/۰۴	۱۹۱	۱۹۳	میزان تار خروجی (kgmol/h)



شکل ۴ - ترکیب گاز خشک به‌دست آمده از شبیه‌سازی

و اگر این ناحیه خیلی بالا باشد واکنش گازسازی ناقص می‌باشد و اتلاف سوخت را در پی دارد. به طوری که برای استفاده از هوا به جای اکسیژن خالص به‌عنوان اکسنده باید شدت جریان هوا و طول راکتور را افزایش داد تا با بالا بردن ناحیه احتراق و افزایش دما کربن خام در خروجی را به حداقل رساند. نتیجه‌های به‌دست آمده از شبیه‌سازی (ترکیب گاز خشک) برای زغال پیتزبورگ برای ارزیابی در قالب شکل ۴ آمده است. در این شکل داده‌های تجربی برای کسر مولی اجزای گاز فراورده در انتهای راکتور نیز برای مقایسه با نتیجه‌های شبیه‌سازی با علامت دایره، مشخص شده است. همچنین ناحیه‌های گوناگون راکتور و مرز آن‌ها از هم تفکیک و روی نمودار مشخص شده است. طول راکتور در برنامه شبیه‌سازی شامل ناحیه گازسازی و احتراق می‌باشد که برابر با ۳/۰۵ متر (۱۰ فوت) است و معادله‌ها برای این ناحیه‌ها حل شده‌اند. نمایش ناحیه پیرولیز در شکل ۴ به صورت شماتیک

مثال در تکرار اول $w = 1$ ، در تکرار دوم $w = 0.95$ ، در تکرار سوم $w = 0.95^2 = 0.9025$ است [۲۵].

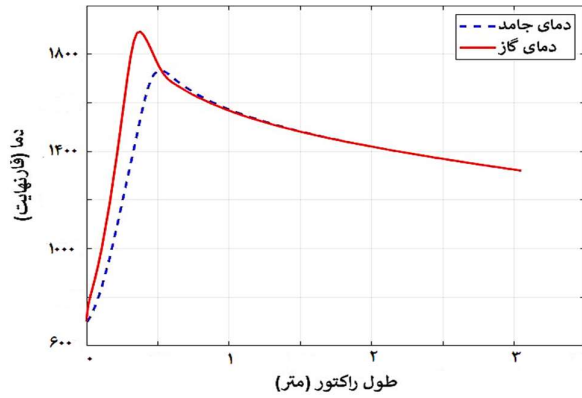
۵- تست همگرایی: تست همگرایی در این الگوریتم مانند سایر الگوریتم‌های بهینه‌سازی است. در این مطالعه تست همگرایی به این صورت است که اگر در ۵۰۰ تکرار متوالی تغییری در مقدار هزینه (جزء مولی هیدروژن در فراورده) بهترین ذره ایجاد نشود، آنگاه الگوریتم پایان می‌یابد، در غیر این صورت الگوریتم به مرحله ۲ باز می‌شود.

نتیجه‌ها و بحث

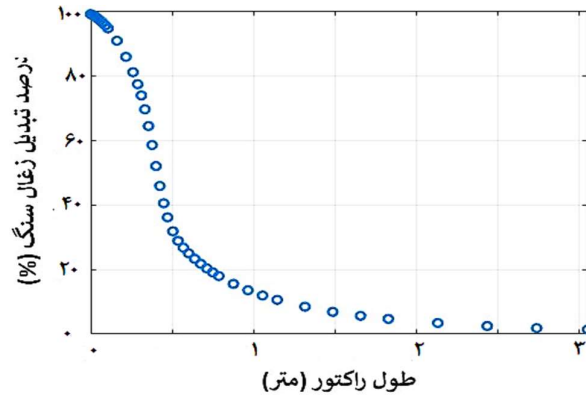
ارزیابی نتیجه‌های مدل

ابتدا برای ارزیابی برنامه، شبیه‌سازی با دمای یکسان برای گاز و جامد انجام می‌شود تا در صورت صحت نتیجه‌ها، با تغییر کد برنامه و اعمال معادله‌های انرژی برای هر دو فاز، شبیه‌سازی با دمای متفاوت برای فاز گاز و جامد صورت گیرد. نتیجه‌های به‌دست آمده از شبیه‌سازی در خصوص ترکیب گاز فراورده در مبنای خشک در جدول ۳ آورده شده است. همان‌گونه که در این جدول دیده می‌شود نتیجه‌های شبیه‌سازی نزدیک به داده‌های تجربی واحد وستفیلد می‌باشند [۲۱].

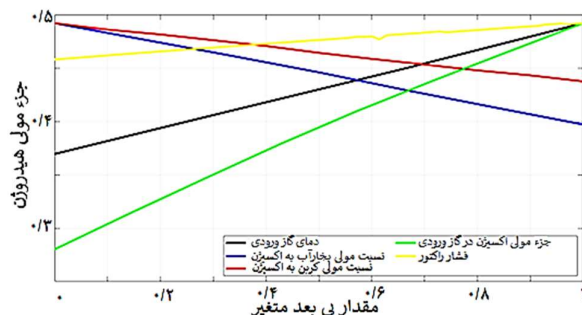
با توجه به برنامه شبیه‌سازی و رسیدن به توزیع دما در طول راکتور در ناحیه گازسازی زغال، واکنش‌های گازسازی با بخار آب و دی‌اکسیدکربن با افت دما کند شده و واکنش‌ها به طور قابل دیده‌ای معکوس می‌شوند و به سمت تعادل پیش می‌روند. همچنین از نمودار توزیع دمای به‌دست آمده از شبیه‌سازی این برداشت می‌شود که دمای بیشینه ناحیه احتراق را مشخص می‌کند و اتمام اکسیژن در مرز ناحیه احتراق و گازسازی می‌باشد؛ اگر این ناحیه در راکتور لورجی پایین باشد کربن خام بیش تری در خاکستر باقی می‌ماند



شکل ۶ - توزیع دمای متفاوت برای فازهای به دست آمده از نتیجه‌های شبیه‌سازی



شکل ۵ - میزان تبدیل کربن در طول راکتور



شکل ۷ - تاثیر شرایط عملیاتی بر جزء مولی هیدروژن در فرآورده

در بالای ۳/۰۵ متر (۱۰ فوت) نشان داده شده است و توزیع اجزای گاز در این ناحیه براساس آنالیز دقیق می‌باشد. همان‌گونه که بیان شد مشخصه ناحیه احتراق از پایین راکتور اتمام اکسیژن و مشخصه ناحیه پیرولیز تولید متان به طور چشم‌گیر می‌باشد. نکته دارای اهمیت دیگر در این نمودار وجود نقطه بیشینه برای دی‌اکسیدکربن به واسطه تولید دی‌اکسید کربن در ناحیه احتراق و مصرف آن در ناحیه گازی‌سازی است که این در نمودارهای توزیع دما نیز قابل مشاهده و تأییدی بر روند صحیح محاسبات می‌باشد [۲۳].

میزان تبدیل جامد و توزیع دما در طول راکتور به ترتیب در شکل‌های ۵ و ۶ نشان داده شده است.

همان‌گونه که از شکل ۵ پیداست، با سقوط دانه جامد از بالای راکتور تا رسیدن به پایین میزان تبدیل کربن افزایش یافته تا در کف راکتور به نزدیک ۱ می‌رسد و فرایند کامل می‌شود اما نکته قابل توجه افزایش شدید میزان تبدیل (شدت واکنش) در ناحیه احتراق به علت سرعت بالای واکنش سوختن نسبت به ناحیه گازی‌سازی می‌باشد.

شکل ۶ توزیع دمای متفاوت برای فازها برگرفته از نتیجه‌ها را نشان می‌دهند. در این شکل با توجه به این که واکنش احتراق گرمازا و واکنش‌های تبدیل به گاز گرماگیر هستند، نمودار دما در امتداد طول راکتور به یک مقدار بیشینه در ناحیه احتراق می‌رسد سپس در ناحیه تبدیل به گاز کاهش می‌یابد. با مقایسه شکل ۶ و نمودار به دست آمده از مدل پایه با دمای مشابه برای فازها مشاهده می‌شود که در شکل ۶ دمای بیشینه جامد بیش تر و به عکس دمای بیشینه گاز کم تر از دمای بیشینه نمودار مدل پایه می‌باشد به عبارتی دمای جامد و گاز متفاوت از دمای متوسط دو فاز می‌باشند. همچنین مکان دمای بیشینه برای جامد پایین تر از مکان دمای بیشینه برای گاز می‌باشد، که این امر به دلیل حمل انرژی توسط گاز به سمت بالا می‌باشد [۲۱].

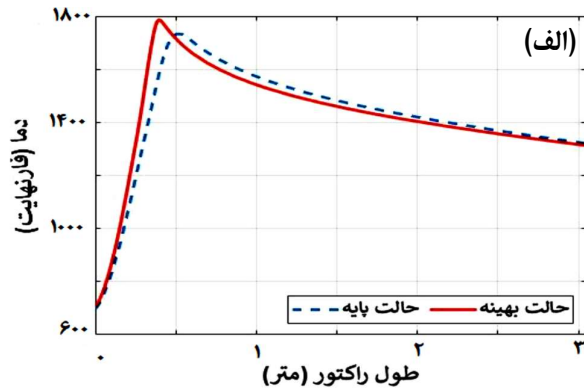
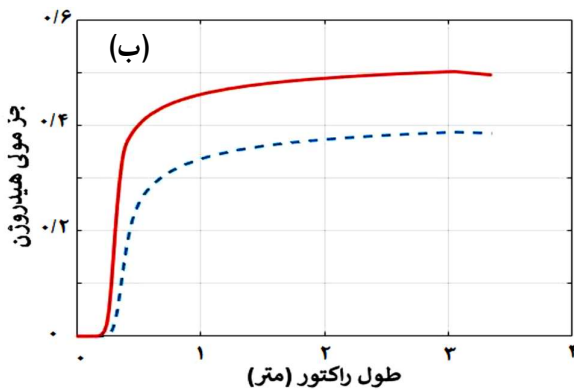
آنالیز حساسیت

شکل ۷ اثر شرایط عملیاتی بر جزء مولی هیدروژن در فرآورده گازی تولیدی را نشان می‌دهد. در بررسی اثر هر متغیر عملیاتی، سایر متغیرهای عملیاتی در حالت بهینه به دست آمده در بخش بهینه‌سازی، ثابت نگه داشته شده‌اند. همچنین محور طولی نمودار بیانگر مقدارهای متغیرهای عملیاتی در حالت بی‌بعد می‌باشد که در بازه {۰ و ۱} بی‌بعد شده‌اند. مقدارهای کمینه و بیشینه متغیرهای بعدی عملیاتی که مطابق آن‌ها بی‌بعدسازی صورت گرفته است، مطابق قیدهای به کار گرفته شده برای بهینه‌سازی (معادله‌های (۲۹) الی (۳۳)) در نظر گرفته شده‌اند.

با افزایش دمای گاز ورودی از آن‌جا که رژیم محدودکننده سرعت واکنش‌های ناحیه گازسازی واکنش شیمیایی می‌باشد، به دو دلیل افزایش ثابت سرعت واکنش‌ها از یک سو و گرماگیر بودن واکنش‌های تولید هیدروژن از سوی دیگر، جزء مولی هیدروژن در فرآورده خروجی افزایش می‌یابد. همچنین مشاهده می‌شود که با افزایش فشار، جزء مولی هیدروژن به صورت جزئی زیاد می‌شود. در کل به دلیل این که

جدول ۴ - شرایط عملیاتی بهینه در فرایند تبدیل به گاز زغال سنگ

دمای گاز ورودی (K)	فشار راکتور (atm)	نسبت مولی بخار آب به اکسیژن ورودی	نسبت مولی کربن به اکسیژن ورودی	جزء مولی اکسیژن در هوای ورودی	جزء مولی هیدروژن در فراورده
۶۵۰	۲۵	۹	۲	۱	۰/۴۹۲



شکل ۸ - مقایسه (الف) توزیع دما و (ب) جزء مولی هیدروژن در طول راکتور در دو حالت پایه و بهینه

شرایط عملیاتی شامل دمای گاز ورودی، فشار راکتور، جزء مولی اکسیژن در هوای ورودی، نسبت مولی بخار آب به اکسیژن ورودی و نسبت مولی کربن به اکسیژن ورودی به عنوان متغیرهای ورودی طبق بازه‌های زیر در نظر گرفته شده‌اند:

$$۵۵۰ \leq ۶۵۰ \leq \text{دمای گاز ورودی (K)} \quad (۳۱)$$

$$۱۸ \leq ۲۵ \leq \text{فشار راکتور (atm)} \quad (۳۲)$$

$$۹ \leq ۱۲ \leq \text{نسبت مولی آب بخار به اکسیژن ورودی} \quad (۳۳)$$

$$۲ \leq ۳ \leq \text{نسبت مولی کربن به اکسیژن ورودی} \quad (۳۴)$$

$$۰/۶ \leq ۱ \leq \text{جزء مولی اکسیژن در هوای ورودی} \quad (۳۵)$$

پاسخ بهینه در جدول ۴ آورده شده است. همان گونه که مشاهده می‌شود پاسخ بهینه در بیشترین مقدارهای دمای گاز ورودی، فشار راکتور و جزء مولی اکسیژن در هوای ورودی و کمترین مقدارهای نسبت‌های بخار آب و کربن به اکسیژن ورودی رخ می‌دهد.

شکل ۸ توزیع دما در ناحیه‌های احتراق و گازسازی و جزء مولی هیدروژن را برای دو حالت پایه و بهینه در طول راکتور به ترتیب نشان می‌دهد. در شرایط بهینه، جزء مولی هیدروژن برابر با ۰/۴۹۲ می‌باشد که نسبت به حالت پایه ۲۴/۳٪ افزایش یافته است.

نتیجه‌گیری

در این مطالعه راکتور بستر متحرک گازسازی زغال سنگ با استفاده از برنامه کامپیوتری در حالت پایا شبیه‌سازی و بهینه‌سازی

در این مدل بنا به شرایط عملیاتی، رژیم محدودکننده واکنش شیمیایی می‌باشد و در انتقال جرم و نفوذ محدودیتی نیست و از آنجا که مجموع ضریب‌های استوکیومتری اجزای گاز در اغلب واکنش‌ها در دو طرف متعادل است، افزایش فشار کم‌ترین تاثیر را در مقایسه با سایر متغیرهای عملیاتی بر عملکرد راکتور دارد.

مطابق شکل ۷، افزایش جزء مولی اکسیژن در هوای ورودی بیش‌ترین تاثیر مثبت را در تولید هیدروژن دارد. این امر بدین دلیل است که با افزایش نسبت اکسیژن در هوای ورودی، از یک سو سرعت واکنش احتراق و از سوی دیگر سرعت واکنش‌های گرماگیر گازسازی در اثر افزایش دما به علت واکنش احتراق افزایش می‌یابند که این امر منجر به افزایش چشم‌گیر میزان تولید هیدروژن می‌شود. سرانجام مشاهده می‌شود، افزایش نسبت بخار آب و کربن به اکسیژن ورودی تاثیر عکس بر میزان تولید هیدروژن دارند. این امر را می‌توان این گونه توجیه نمود که با افزایش نسبت زغال به اکسیژن ورودی به دلیل کمبود اکسیژن و تأمین گرما، میزان تبدیل کربن و در نتیجه واکنش‌های گازسازی به طور قابل دیده‌ای کاهش می‌یابند.

نتیجه‌های بهینه‌سازی

در این بخش نتیجه‌ها الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذره‌ها برای فرایند گازسازی زغال سنگ آورده شده است. از آنجا که هدف مطالعه بیشینه نمودن تولید هیدروژن می‌باشد، در نتیجه جزء مولی هیدروژن به عنوان تابع ارزیابی در نظر گرفته می‌شود.

واکنش‌های ناحیه گازسازی واکنش شیمیایی می‌باشد، به دو دلیل افزایش ثابت سرعت واکنش‌ها از یک سو و گرماگیر بودن واکنش‌های تولید هیدروژن از سوی دیگر، جزء مولی هیدروژن در فراورده خروجی افزایش می‌یابد. همچنین به دلیل این که در این مدل بنا به شرایط عملیاتی، رژیم محدودکننده واکنش شیمیایی می‌باشد و در انتقال جرم و نفوذ محدودیتی نیست و از آنجا که مجموع ضریب‌های استوکیومتری اجزای گاز در اغلب واکنش‌ها در دو طرف متعادل است، افزایش فشار کم‌ترین تاثیر را در مقایسه با سایر متغیرهای عملیاتی بر عملکرد راکتور دارد. همچنین مشاهده شد که افزایش جزء مولی اکسیژن در هوای ورودی بیش‌ترین تاثیر مثبت را در تولید هیدروژن دارد. این امر بدین دلیل است که با افزایش نسبت اکسیژن در هوای ورودی، از یک سو سرعت واکنش احتراق و از سوی دیگر سرعت واکنش‌های گرماگیر گازسازی در اثر افزایش دمای به علت واکنش احتراق افزایش می‌یابند که این امر منجر به افزایش چشم‌گیر میزان تولید هیدروژن می‌شود. سرانجام مشاهده شد که افزایش نسبت بخار آب و کربن به اکسیژن ورودی تاثیر عکس بر میزان تولید هیدروژن دارند. این امر را می‌توان این‌گونه توجیه نمود که با افزایش نسبت زغال به اکسیژن ورودی به دلیل کمبود اکسیژن و تأمین گرما، میزان تبدیل کربن و در نتیجه واکنش‌های گازسازی به طور قابل دیده‌ای کاهش می‌یابند.

شد. گرچه آثاری در خصوص مدل‌سازی راکتور بستر متحرک گازسازی زغال به چاپ رسیده است اما مطالعه‌های پارامتریک محدودی برای بررسی و بهینه‌سازی اثر متغیرهای گوناگون روی عملکرد راکتور در دسترس است. همچنین در این مطالعه شبیه‌سازی با دمای مجزا برای گاز و جامد برای تعیین دمای بیشینه دقیق فازهای گاز و جامد، اعمال سینتیک تمام واکنش‌های ممکن، استفاده هم‌زمان از مدل‌های هسته کوچک‌شونده و حجمی در ناحیه‌های گوناگون راکتور و در نظر گرفتن توزیع اجزای گاز در مرحله پیرولیز، صورت گرفته است که از مهم‌ترین نوآوری‌های کار حاضر می‌باشند. نتیجه‌های شبیه‌سازی با اطلاعات تجربی راکتور وستفیلد اسکاتلند تطبیق داده شد که نتیجه‌ها رضایت‌بخش بود. از برتری‌های این برنامه امکان تغییر پارامترها و ثوابت و اعمال شرایط عملیاتی گوناگون در بازه مناسب توسط کاربر می‌باشد. در نتیجه برای تنظیم متغیرهای عملیاتی برای عملکرد بهینه راکتور در تولید هیدروژن، از الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذره‌ها استفاده شده است. نتیجه‌های بهینه‌سازی نشان داد که شرایط بهینه عملکردی شامل بالاترین دمای گاز ورودی، فشار راکتور و پایین‌ترین نسبت بخار آب و کربن به اکسیژن ورودی در بازه ممکن عملیاتی به همراه اکسیژن ورودی خالص می‌باشد. در این حالت نسبت به حالت پایه، میزان تولید هیدروژن ۳/۲۴٪ افزایش می‌یابد که نشان از اهمیت بهینه‌سازی دارد. در پایان آنالیز حساسیت شرایط عملیاتی بر میزان تولید هیدروژن در حالت بهینه صورت گرفت. نتیجه‌ها نشان داد که با افزایش دمای گاز ورودی از آنجا که رژیم محدودکننده سرعت

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱۲/۱۸؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۳/۲۴

مراجع

- [1] Seyitoglu S., Dincer I., Kilicarslan A., [Energy and Exergy Analyses of Hydrogen Production by Coal Gasification](#), *International Journal of Hydrogen Energy*, **42(4)**: 2592-2600 (2017).
- [2] Jin H., Chen Y., Ge Z., Liu S., Ren C., Guo L., [Hydrogen Production by Zhundong Coal Gasification in Supercritical Water](#), *International Journal of Hydrogen Energy*, **40(46)**: 16096-16103 (2015).
- [3] Van Dyk J., Keyser M., Coertzen M., [Syngas Production from South African Coal Sources using Sasol-Lurgi Gasifiers](#), *International Journal of Coal Geology*, **65(3-4)**: 243-253 (2006).
- [4] Singh N., Raghavan V., Sundararajan T., [Mathematical Modeling of Gasification of High-Ash Indian Coals in Moving Bed Gasification System](#), *International Journal of Energy Research*, **38(6)**: 737-754 (2014).
- [5] Yoon H., Wei J., Denn M.M., [A Model for Moving-Bed Coal Gasification Reactors](#), *AIChE Journal*, **24(5)**: 885-903 (1978).

- [6] Stiegel G.J., Ramezan M., [Hydrogen from Coal Gasification: An Economical Pathway to a Sustainable Energy Future](#), *International Journal of Coal Geology*, **65(3-4)**: 173-190 (2006).
- [7] Shoko E., et al., [Hydrogen from Coal: Production and Utilisation Technologies](#), *International Journal of Coal Geology*, **65(3-4)**: 213-222 (2006).
- [8] Cormos C.-C., Starr F., Tzimas E., Peteves S., [Innovative Concepts for Hydrogen Production Processes based on Coal Gasification with CO₂ Capture](#), *International Journal of Hydrogen Energy*, **33(4)**: 1286-1294 (2008).
- [9] Iwaszenko S., Howanec N., Smoliński A., [Determination of Random Pore Model Parameters for Underground Coal Gasification Simulation](#), *Energy*, **166**: 972-978 (2019).
- [10] Vascellari M., Roberts D.G., Hla S.S., Harris D.J., Hasse C., [From Laboratory-Scale Experiments to Industrial-Scale CFD Simulations of Entrained Flow Coal Gasification](#), *Fuel*, **152**: 58-73 (2015).
- [11] Duan W., Yu Q., Wang K., Qin Q., Hou L., Wu T., [ASPEN Plus Simulation of Coal Integrated Gasification Combined Blast Furnace Slag Waste Heat Recovery System](#), *Energy Conversion and Management*, **100**: 30-36 (2015).
- [12] Akhlas J., Baesso S., Bertuccio A., Ruggeri F., [Coal Gasification by Indirect Heating in a Single Moving Bed Reactor: Process Development & Simulation](#), *AIMS Energy*, **3(4)**: 635-665 (2015).
- [13] Govind R., Shah J., [Modeling and Simulation of an Entrained Flow Coal Gasifier](#), *AIChE Journal*, **30(1)**: 79-92 (1984).
- [14] Biagini E., Pannocchia G., Zanobini M., Gigliucci G., Riccardi I., Donatini F., Tognotti L., ["Process Optimization of Hydrogen Production from Coal Gasification"](#), *In 29th Meeting on Combustion*, Conference Paper, June, (2006).
- [15] Zeng L., He F., Li F., Fan L.-S., [Coal-Direct Chemical Looping Gasification for Hydrogen Production: Reactor Modeling and Process Simulation](#), *Energy & Fuels*, **26(6)**: 3680-3690 (2012).
- [16] Levenspiel O., [Chemical Reaction Engineering](#), *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **38(11)**: 4140-4143 (1999).
- [17] Niksir A., Rahimi A., ["Mathematical Modeling and Simulation of Fluorination Reaction of Uranium Dioxide and Evaluation of Existing Gas-Solid Reaction Models"](#) *5th International Chemical Engineering, Congress and Exhibition*, Kish Island, Iran, 2-5 January (2008).
- [18] Kulkarni M., Ganguli R., [Moving Bed Gasification of Low Rank Alaska Coal](#), *Journal of Combustion*, **2012**: 918754 (2012).
- [19] Belghit A., El Issami S., [Hydrogen Production by Steam Gasification of Coal in Gas-Solid Moving Bed using Nuclear Heat](#), *Energy Conversion and Management*, **42(1)**: 81-99 (2001).
- [20] Belghit A., Gordillo E., El Issami S., [Coal Steam-Gasification Model in Chemical Regime to Produce Hydrogen in a Gas-Solid Moving Bed Reactor using Nuclear Heat](#), *International Journal of Hydrogen Energy*, **34(15)**: 6114-6119 (2009).

- [21] Wen C., Chen H., Onozaki M., [User's Manual for Computer Simulation and Design of the Moving-Bed Coal Gasifier. Final Report](#), West Virginia Univ., Morgantown (USA), Dept. of Chemical Engineering, (1982).
- [22] Bibrzycki J., [Investigations of Coal Particle Combustion and Gasification](#), PH.D. Thesis, Clausthal University of Technology, Germany, (2015).
- [23] Adanez J., Labiano F.G., [Modeling of Moving-Bed Coal Gasifiers](#), *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **29(10)**: 2079-2088 (1990).
- [24] Nouri S.M.M., Ale Ebrahim H., Jamshidi E., [Simulation of Direct Reduction Reactor by the Grain Model](#), *Chemical Engineering Journal*, **166(2)**: 704-709 (2011).
- [25] Olsson A.E., ["Particle Swarm Optimization: Theory, Techniques and Applications"](#), Nova Science Publishers, Inc. (2010).
- [26] Doctor S., Venayagamoorthy G.K., Gudise V.G., ["Optimal PSO for Collective Robotic Search Applications"](#), *Proceedings of the 2004 Congress on Evolutionary Computation*, Portland, USA, 19-23, June, (2004).