

شبیه‌سازی عددی فرایند گازی‌سازی مخلوط آسفالت-آب در یک گازساز جریان حامل

حسین مهدوی مقدم^{۱*} و کامران یوسفی مجیر^۲

۱- استادیار، مهندسی هوافضا، دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، mahdavy@kntu.ac.ir

۲- کارشناس ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه آزاد- واحد علوم و تحقیقات، تهران، Kamran.yfsm@gmail.com

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۹۷/۴/۲۵، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۷/۸/۱۵، پذیرش: ۹۷/۹/۲)

چکیده: در این مقاله شبیه‌سازی عددی فرایند گازی‌سازی آسفالت آبکی (ذرات آسفالت مخلوط‌شده با آب) به‌عنوان یک سوخت مایع سنگین نفتی در داخل یک گازساز تک‌مرحله‌ای جریان حامل، با استفاده از نرم افزار تجاری انسیس فلونت نسخه ۱۵، در یک هندسه دوبعدی و بر اساس رویکرد اویلری-لاگرانژی انجام شده است. در این شبیه‌سازی توزیع سرعت، توزیع دما و توزیع کسر مولی گونه‌های گاز سنتز، محاسبه شده‌اند. اثر مدل‌های مختلف فرار زدایی، اندازه ذرات فاز گسسته و همچنین برای اولین بار اثر استفاده از ذرات غیرکروی در فاز گسسته بر روی پارامترهای گازی‌سازی بررسی شده‌اند. نتایج به‌دست آمده از این تحقیق مشخص کرد که مخلوط آبکی آسفالت می‌تواند به‌عنوان خوراک مناسبی برای گازی‌سازی استفاده شود. در بررسی ذرات غیرکروی مشخص شد در صورت استفاده از ذرات با فاکتور شکل یک‌دهم، که بیشترین تفاوت را با ذرات کروی دارند، دمای محفظه اندکی افزایش و دمای بیشینه در فاصله نزدیک‌تری نسبت به ورودی ماده خوراک حاصل می‌شود.

کلیدواژه‌گان: سوخت‌های سنگین نفتی، راکتور جریان حامل، گازی‌سازی، فاز گسسته

مقدمه

کاهش کیفیت نفت خام و افزایش فشار قوانین زیست‌محیطی سبب شده است گرایش عمده‌ای برای استفاده از تکنولوژی‌های جدید برای بهره‌برداری از پسماندهای ضایعاتی نفت خام در پالایشگاه‌ها بوجود آید. کاهش کیفیت نفت خام با افزایش گوگرد موجود در نفت خام اولیه همراه است که چنین روندی منجر به افزایش تولید سوخت‌ها و پسماندهای سنگین و در نتیجه اهمیت یافتن فرایندهای ارتقا از جمله گازی‌سازی^۱ می‌شود.

تکنولوژی گازی‌سازی می‌تواند انرژی پاک و کارآمد تولید کند. این تکنولوژی قادر به تولید گاز سنتز از سوخت‌های پایه کربنی با کیفیت پایین مانند زغال‌سنگ، کک نفتی، سوخت‌های نفتی با سولفور زیاد، پسماندها و زیست‌توده‌هاست. این گاز می‌تواند به‌جای گاز طبیعی برای تولید الکتریسیته یا به‌عنوان مواد اولیه برای تولید محصولات شیمیایی و سوخت‌های مایع استفاده شود. در فرایند گازی‌سازی از حرارت، فشار و بخار مستقیماً برای تبدیل خوراک به گازی متشکل از کربن مونوکسید و هیدروژن استفاده می‌شود [۱].

در سال ۲۰۰۲، واتانابه و همکاران، یک مدل عددی برای طراحی و ارزیابی عملکرد گازی‌سازی سوخت مایع بسیار سنگین در یک گازساز^۱ جریان حامل^۲ ایجاد کردند. چهار فرایند واکنشی اتمیزاسیون، پیرولیز، گازی‌سازی کک و واکنش‌های فاز گازی مدل‌سازی شدند. انتقال ذره با رویکرد ردیابی ذرات لاگرانژی مدل‌سازی شد. مقایسه بین نتایج محاسباتی و نتایج آزمایشگاهی در مورد گازساز تحقیقاتی برای سوخت مایع نشان داد که توزیع دمایی، توزیع ترکیب گاز، ارزش حرارتی و بازده تبدیل کربن مطابقت خوبی با نتایج آزمایشگاهی دارند [۲].

آشیزاوا و همکاران، در سال ۲۰۰۵، خصوصیات سوخت بسیار سنگین نفتی اوریمولشن^۳ را در یک گازساز تحقیقاتی با ظرفیت ۲/۴ تن در روز بررسی کردند. اوریمولشن یک سوخت مبتنی بر بیتومن^۴ و شامل ۳۰٪ آب و ۷۰٪ بیتومن است. آن‌ها نمونه‌هایی از چار^۵ و گاز را از قسمت‌های مختلف گازساز جمع‌آوری کردند و دریافتند که بازده تبدیل کربن در یک سوم قسمت بالایی گازساز بیشترین مقدار را دارد. همچنین، تجزیه گاز نشان داد که غلظت مونوکسید کربن، بخار آب و متان در طول گازساز کاهش می‌یابد، درحالی‌که، غلظت دی‌اکسید کربن و هیدروژن افزایش می‌یابد [۳].

بنی‌سعد و همکاران در سال ۲۰۱۶، یک مطالعه پارامتریک بر روی گازی‌سازی سوخت‌های مایع انجام داده‌اند. آن‌ها یک مدل سینتیک گازی‌سازی سوخت سنگین را برای بررسی تاثیر نرخ اکسیژن و فشار روی کیفیت گاز سنتز و کارایی پارامترها توسعه دادند. نتایج آن‌ها نشان داد افزایش نرخ اکسیژن ارزش حرارتی گاز سنتز و بازدهی گازی‌سازی را بهبود می‌بخشد. همچنین، آن‌ها نشان دادند که افزایش فشار اثر جزیی روی این فرایند دارد [۴].

طراحی مطلوب یک گازساز برای تبدیل ماده خوراک ورودی به گاز سنتز دلخواه به مشخصات دقیق فرایندهای مربوطه و همچنین، درک درستی از فرایندهای فیزیکی و شیمیایی که داخل گازساز اتفاق می‌افتد نیاز دارد. نوشتن معادلات شیمیایی برای بیان واکنش‌های فیزیکی، شیمیایی و حرارتی که در محفظه گازساز اتفاق می‌افتد کار مشکلی نیست. از لحاظ تئوری فرایندهای گازی‌سازی می‌توانند طوری طراحی شوند که گرمای آزاد شده (از واکنش‌های گرمازا) با گرمای موردنیاز واکنش‌های گرماگیر موازنه شوند. اما، در واقعیت خیلی از واکنش‌ها ممکن است به‌صورت هم‌زمان انجام شوند، بنابراین، پیش‌بینی دقیق کمی و کیفی ترکیب گاز محصول تاحدی دشوار است. در صورت وجود خصوصیات ترمودینامیکی و تعادلی سیستم‌های گازی‌سازی می‌توان شرایطی که تحت آن بعضی از محصولات موردنظر به‌حد اکثر می‌رسند را محاسبه کرد. ولی، اندازه‌گیری خواص ترمودینامیکی ماده خوراک، مانند زغال سنگ، چار، زیست‌توده و کک نفتی به‌دلیل ماهیت پیچیده و ناهمگن بودن این مواد بسیار دشوار است.

بیشتر مطالعات تجربی به‌طور معمول بر روی فرایندهای گازی‌سازی زغال سنگ متمرکز شده است. اخیراً، محققان گازی‌سازی زیست‌توده را نیز بررسی کرده‌اند [۱]. اگرچه بیشتر این تحقیقات یک گازی‌سازی دومرحله‌ای (یک پیرولیز سریع و به‌دنبال آن یک واکنش آهسته چار با هیدروژن) را فرض می‌کنند، ولی تنوع قابل توجهی در مکانیزم‌های پیشنهادی و سینتیک‌های ارائه‌شده وجود دارد. این تنوع در تعداد و نوع واکنش‌ها و همچنین، ضرایب سینتیکی می‌تواند ناشی از نوع ماده خوراک استفاده‌شده، دامنه شرایط آزمایشگاهی به‌کار گرفته‌شده، تفاوت در روش‌های مورد استفاده برای توصیف نتایج تجربی و طراحی سیستم راکتور باشد. سینتیک گازی‌سازی، به‌ویژه گازی‌سازی مواد جامد کربن‌دار، هنوز موضوع تحقیقات و بحث‌های بسیار است [۱].

1. Gasifier
2. Entrained flow
3. Orimulsion
4. Bitumen
5. Char

سازوکار گازی سازی

خوراک آسفالت آبکی^۱ به صورت قطرات بسیار ریز به داخل گازساز تزریق می شود (شکل ۱). توزیع اندازه قطرات ورودی به گازساز همان توزیع اندازه ذرات آسفالت در خوراک آبکی است که با استفاده از روش توزیع قطر روزین-راملر^۲ مدل می شود. بعد از ورود خوراک آبکی به داخل گازساز، قطرات به سرعت گرم می شوند. زمانی که دمای قطرات به دمای تبخیر می رسد، فرایند تبخیر آغاز و تا زمان رسیدن دمای قطرات به دمای نقطه جوش، تبخیر ادامه می یابد. نرخ تبخیر به وسیله فشار جزئی بخار محیط و فشار اشباع بخار در سطح قطره کنترل می شود. در این مقاله یک پیرولیز دومرحله ای برای آسفالت فرض می شود: مرحله اول ماده فرار از ذره آسفالت مطابق واکنش (۱) جدا می شود و مرحله دوم تجزیه حرارتی ماده فرار مطابق واکنش (۲) رخ می دهد [۵].

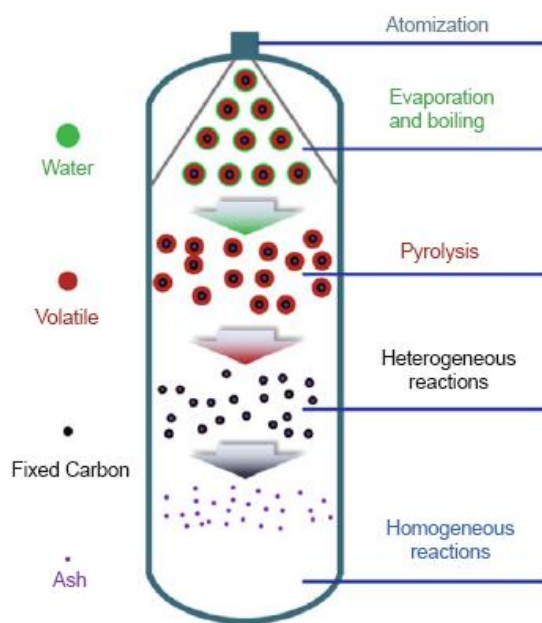
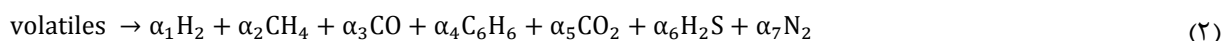


Figure 1- The gasification process of asphalt water slurry

شکل ۱- فرایند گازی سازی مخلوط آبکی آسفالت [۵]

در واکنش (۲) ترکیب مواد فرار از آنالیزهای تقریبی^۳ و نهایی^۴ ماده آسفالت محاسبه می شوند. واکنش های ناهمگن در فرآیند گازی سازی شامل واکنش های کک نفتی با اکسیژن، کربن دی اکسید و بخار و واکنش های همگن احتراق، جابجایی آب-گاز، واکنش های متان-بخار و ... است. جدول ۱ واکنش های در نظر گرفته شده در این مقاله برای گازی سازی خوراک آسفالت آبکی را نشان می دهد.

1. Slurry
2. Rosin-Rammler
3. Proximate
4. Ultimate

جدول ۱- واکنش‌های همگن و ناهمگن گازی سازی آسفالت [۵]

Table 1- Homogeneous and heterogeneous reactions

Reaction No.	Reactions	Heat of Reaction (KJ/mol)
1	$C_6H_6 + CO_2 \rightarrow 6CO + 3H_2$	-746
2	$C_6H_6 + 6H_2O \rightarrow 6CO + 9H_2O$	+705
3	$CO + 0.5O_2 \rightarrow CO_2$	-283
4	$H_2 + 0.5O_2 \rightarrow H_2O$	-242
5	$CH_4 + 0.5O_2 \rightarrow CO + 2H_2$	-37.5
6	$CH_4 + H_2O \leftrightarrow CO + 3H_2$	+203
7	$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	-41.1
8	$C + 0.5O_2 \rightarrow Co$	-111
9	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	+172
10	$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	+131

معادلات حاکم

برای شبیه‌سازی عددی در این مقاله، معادلات ناویر استوکس حالت پایا دوبعدی در یک دستگاه اویلری-لاگرانژی حل می‌شوند. تمام ذرات سوخت به‌عنوان یک فاز ثانویه مجزا که در فاز پیوسته پراکنده شده از طریق مدل فاز گسسته^۱ ارزیابی می‌شوند.

معادلات فاز سیال

در فاز سیال معادلات بقای جرم، بقای تکانه، بقای انرژی و انتقال گونه‌ها^۲ در شرایط پایا و به‌صورت میانگین‌گیری زمانی حل می‌شوند. شکل کلی معادلات حاکم به‌صورت روابط (۱) تا (۴) است.

بقای جرم:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (1)$$

بقای تکانه:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (2)$$

بقای انرژی:

$$\nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + P)) = \nabla \cdot (K_{eff} \nabla T + (\bar{\tau}_{eff} \cdot \vec{v})) + S_h - \sum h \vec{j}_i \quad (3)$$

انتقال گونه‌ها:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot j_i + R_i + S_i \quad (4)$$

مدل‌سازی آشفته‌گی

جریان‌های آشفته با میدان‌های نوسانی سرعت مشخص می‌شوند. مدل‌های آشفته با حل یک‌سری معادلات انتقال اضافی، پارامترهای موردنیاز برای حل میدان‌های مغشوش (تنش‌های رینولدز) را محاسبه می‌کند. در مطالعه حاضر، با توجه به آشفته‌بودن جریان و نداشتن چرخش، ورتیسیتی و انحنای شدید در جریان درون گازساز مدل k-ε در حالت استاندارد انتخاب شده است. این مدل یکی از مدل‌های معروف جریان اغتشاشی در دینامیک سیالات است که به‌عنوان یک مدل استاندارد و پرکاربرد در صنعت شناخته می‌شود. از مزایای این مدل سادگی، پایداری، همگرایی راحت، حساسیت کم نسبت به مشخصات جریان آزاد مثل شدت اغتشاشات، هزینه محاسباتی پایین و نتایج قابل قبول برای گستره وسیعی از جریان‌هاست.

1. Discrete phase
2. Species

مدل سازی واکنش های شیمیایی

شکل کلی معادله انتقال گونه های شیمیایی مطابق با رابطه (۴) است. در این معادله R_i نرخ خالص تولید یا مصرف گونه شیمیایی i است که برابر با حاصل جمع نرخ واکنش هایی که گونه i در آن هاست و با رابطه (۵) بیان می شود. همچنین، نرخ مولی آرنیوسی به وجود آمدن و یا مصرف شدن گونه شیمیایی i در واکنش r از رابطه (۶) و ثابت نرخ واکنش با استفاده از رابطه (۷) محاسبه می شوند.

$$R_i = M_{w,i} \sum_{N_r} \hat{R}_{r,i} \quad (5)$$

$$\hat{R}_{i,r} = (v''_{i,r} - v'_{i,r}) \left[k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{(\eta'_{j,r} + \eta''_{j,r})} \right] \quad (6)$$

$$k_{f,r} = A_r T^\beta \exp(-E/RT) \quad (7)$$

برای برهم کنش شیمی و آشفستگی از مدل نرخ محدود^۱ - اتلاف گردابه^۲ استفاده می شود. به کمک این مدل نرخ واکنش های فاز پیوسته به طور جداگانه با استفاده از مدل نرخ محدود ($R_{i,chem}$) و مدل اتلاف گردابه ($R_{i,tur}$) محاسبه و از بین آن ها مقدار کوچک تر برای محاسبه نرخ واکنش های فاز پیوسته ($R_{i,gas}$) انتخاب می شود [۵].

همان طور که در رابطه (۹) مشاهده می شود، در مدل اتلاف گردابه برای محاسبه نرخ واکنش نیز دو رابطه وجود دارد که از بین این دو رابطه هر کدام که مقدار کمتری دارد تعیین کننده نرخ واکنش است.

$$R_{i,chem} = A_r T^\beta \exp(-E/RT) \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta_j} \quad (8)$$

$$R_{i,tur} = \min \left(v'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\epsilon}{k} \min_R \left[\frac{Y_R}{v'_{R,r} M_{w,R}} \right], v'_{i,r} M_{w,i} A B \rho \frac{\epsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j v'_{j,r} M_{w,j}} \right) \quad (9)$$

$$R_{i,gas} = \min(R_{i,chem}, R_{i,tur}) \quad (10)$$

مقادیر آرنیوسی واکنش های شیمیایی همگن مورد استفاده در رابطه (۸) مطابق جدول ۲ است.

جدول ۲- پارامترهای سینتیک واکنش های همگن

Table 2- Kinetic parameters of Homogeneous reactions

Reaction No.	Reaction Rate	Ref.
1	$r_3 = \text{Eddy-dissipation only}$	[5]
2	$r_4 = 3.0 \times 10^8 \exp\left(-\frac{1.26 \times 10^8}{8314T}\right) [C_6H_6][H_2O]$	[6]
3	$r_5 = 1.0 \times 10^{17.6} \exp\left(-\frac{1.67 \times 10^8}{8314T}\right) [CO][H_2O]^{0.5}[O_2]^{0.25}$	[7]
4	$r_6 = 2.5 \times 10^6 T^{-1} \exp\left(-\frac{1.68 \times 10^8}{8314T}\right) [H_2]^{0.5}[H_2O]^{-1}[O_2]^{2.25}$	[6]
5	$r_7 = 4.4 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{1.26 \times 10^8}{8314T}\right) [CH_4]^{0.5}[O_2]^{1.25}$	[6]
6	$r_8 = 3.0 \times 10^8 \exp\left(-\frac{1.26 \times 10^8}{8314T}\right) ([CH_4][H_2O] - [CO][H_2]/K_{11})$ $K_{11} = 8.74 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{26533}{T}\right)$	[6]
7	$r_9 = 2.34 \times 10^{10} \exp\left(-\frac{2.883 \times 10^8}{8314T}\right) ([CO][H_2O] - [CO_2][H_2]/K_{12})$ $K_{12} = 0.0265 \exp\left(\frac{3968}{T}\right)$	[8]

1. Finite rate
2. Eddy dissipation

مدل سازی تابش

مدل تابشی پی وان^۱ برای محاسبه شار تشعشعی دیواره‌های داخل گازساز استفاده می‌شود. این مدل تشعشعی ساده‌ترین حالت مدل عمومی پی وان^۲ است. این مدل از لحاظ محاسباتی مقرون به صرفه است و به راحتی می‌تواند در هندسه‌های پیچیده اعمال شود [۹]. در این مدل، ترم چشمه در معادله انرژی از روابط (۱۱) و (۱۲) محاسبه می‌شود.

$$S_h = -\nabla \cdot q_r = aG - 4a\sigma T^4 \quad (11)$$

$$q_r = -\frac{1}{3(a - \sigma_s) - C\sigma_s} \nabla G \quad (12)$$

معادلات حاکم بر فاز گسسته

بقای جرم ذره

فاز ثانویه شامل ذرات سوخت و قطرات آب است. جریان‌هایی که در آن کسر حجمی فاز پراکنده کمتر از ده درصد است را می‌توان با استفاده از مدل فاز گسسته مدل‌سازی کرد [۱۰]. هر ذره پس از ورود به گازساز و در حین گازی‌سازی عموماً سه فرایند مختلف خشک‌سازی، تجزیه حرارتی و واکنش‌های غیرهمگن را تجربه می‌کند. هر یک از فرایندهای ذکر شده باعث ایجاد تغییراتی در جرم ذره می‌شوند که نرخ این تغییرات را می‌توان از طریق قانون بقای جرم رابطه (۱۳) محاسبه کرد [۱۱].

$$\frac{dm_p}{dt} = \frac{dm_w}{dt} + \frac{dm_v}{dt} + \frac{dm_c}{dt} \quad (13)$$

مدل‌سازی تبخیر

زمانی که دمای درون گازساز به دمای تبخیر می‌رسد، رطوبت از درون بافت و سطح ذرات شروع به تبخیر می‌کند. نرخ تبخیر در حین فرایند خشک‌کردن از رابطه (۱۴) به دست می‌آید [۱۱].

$$\frac{dm_w}{dt} = A_p M_w D_{vg} (C_s - C_\infty) \quad (14)$$

با ادامه فرایند حرارت‌دهی و زمانی که دمای فاز جامد به بالاتر از دمای جوشش آب برسد، نرخ تبخیر از رابطه (۱۵) محاسبه می‌شود [۱۱].

$$\frac{dm_w}{dt} = \frac{\pi d_p k_c}{c_p} (2.0 + 0.46 Re^{0.5}) \times \ln \left(1 + \frac{c_p (T_g - T_p)}{h_{fg}} \right) \quad (15)$$

مدل‌سازی فرارزدایی

در نرم‌افزار فلوئنت، هنگامی که دمای ذره بزرگ‌تر از دمای تبخیر شود یعنی $T_p \geq T_{vap}$ ، قانون جداشدن مواد فرار بر روی ذره اعمال می‌شود. از آنجا که، مدل دو نرخ رقابتی^۳ توانایی کنترل فرارزدایی^۴ در بازه‌های دمای مختلف را دارد [۹] و هزینه محاسباتی آن نیز مناسب است، در این مقاله از این مدل استفاده شده است. روابط (۱۶) و (۱۷) نرخ سینتیک تجزیه ماده فرار به شکل پیشنهادشده توسط کوبایاشی است [۱۲].

$$R_1 = A_1 e^{-\left(\frac{E_1}{RT_p}\right)} \quad A_1 = 2 \times 10^5, E_1 = 1.046 \times 10^7 \text{ J/kg.mol} \quad (16)$$

$$R_2 = A_2 e^{-\left(\frac{E_2}{RT_p}\right)} \quad A_2 = 1.3 \times 10^7, E_2 = 1.67 \times 10^8 \text{ J/kg.mol} \quad (17)$$

1. P-1

2. P-N

3. Two competing rates (Kobayashi model)

4. Devolatilization

$$\frac{m_v(t)}{(1-f_{w,0})m_{p,0}-m_a} = \int_0^t (\alpha_1 R_1 + \alpha_2 R_2) \exp \left[- \int_0^t (R_1 + R_2) dt \right] dt \quad (18)$$

که در آن، R_1 و R_2 نرخ‌های رقابتی اند که می‌توانند تجزیه شدن ذره به ماده فرار را بر روی بازه‌های مختلف دمایی کنترل کنند. دو نرخ سینتیکی با توجه به میزان بهره، وزن‌بندی می‌شوند. در رابطه (۱۸)، عبارت $m_v(t)$ بیانگر مقدار ماده فرار جدا شده، $f_{w,0}$ کسر جرمی ماده بخار شده (آب)، $m_{p,0}$ جرم اولیه ذره و m_a محتوای خاکستر است [۱۳].

مدل‌سازی احتراق کربن

با خروج مواد فرار از درون ذرات و ادامه فرایند حرارت‌دهی ذرات کربن باقیمانده از مرحله فرارزادایی شروع به انجام واکنش با محیط اطراف می‌کند. در این حالت، نرخ تغییرات جرم ذره حین واکنش از طریق مدل احتراق چندگانه کربن به صورت رابطه (۱۹) محاسبه می‌شود [۱۴].

$$\frac{dm_c}{dt} = A_p \eta_r Y_j R_{r,c} \quad (19)$$

پارامترهای سینتیک واکنش‌های ناهمگن مطابق جدول ۳ است.

جدول ۳- پارامترهای سینتیک واکنش‌های ناهمگن

Table 3- Kinetic parameters of Heterogeneous reactions

Reaction No.	A_0 Kg/(m ² .s.pa ⁿ)	E (J/Kmol)	n	Ref.
8	1.7016	1.55×10^8	0.64	[11]
9	0.0253	2.14×10^8	0.65	[11]
10	0.4114	2.38×10^8	0.56	[11]

بقای تکانه ذره

در دیدگاه لاگرانژی، هر ذره به تنهایی ردیابی می‌شود. برای به دست آوردن معادلات حرکت ذرات می‌توان از قانون دوم نیوتن استفاده کرد [۱۵]. ذرات در جریان سیال می‌توانند با نیروهای پسا^۱ هیدرودینامیکی و اینرسی مواجه شوند. به سبب نیروهایی که بر ذرات در میدان سیال اعمال می‌شوند آن‌ها می‌توانند شتاب گرفته یا آهسته شوند. تغییرات سرعت به وسیله بالانس نیرو روی ذره محاسبه می‌شود. بالانس نیرو روی ذرات فاز گسسته توسط معادله تکانه در این فاز بیان می‌شود.

$$\frac{du_p}{dt} = F_D (\vec{v}_g - \vec{v}_p) + \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho_g)}{\rho_p} + \vec{F} \quad (20)$$

$$F_D = \frac{18\mu C_D Re_p}{\rho_p d_p^2 24} \quad (21)$$

$$Re_p = \frac{\rho_g d_p |\vec{v}_g - \vec{v}_p|}{\mu} \quad (22)$$

ضریب پسا برای ذرات صاف و کروی در محدوده اعداد رینولدز $0.1 < Re < 50000$ از رابطه (۲۳) به دست می‌آید که ضرایب a_1 و a_2 و a_3 در محدوده‌های مختلف عدد رینولدز از مطالعه الکساندر قابل محاسبه‌اند [۱۶].

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2} \quad (23)$$

برای بررسی تاثیر شکل ذره بر روی پارامترهای گازی‌سازی در مطالعه حاضر ذرات غیرکروی نیز بررسی می‌شوند. همان‌طور که گفته شد، در این پژوهش، در ابتدا نیروی پسا با فرض کروی بودن ذرات محاسبه می‌شود. در شبیه‌سازی گازی‌سازی جریان حامل، تنها جایی که نرم افزار فلوئنت بین ذرات کروی و غیر کروی تفاوت قائل می‌شود، تعریف نیروی پسا ذرات فاز گسسته

1. Drag

است. در تعریف نیروی درگ برای ذرات غیرکروی فرض می‌شود که تمام ذرات شکل یکسانی دارند و تفاوت شکل ذره با ذره کروی شکی با فاکتور شکل ϕ مشخص می‌شود. رابطه (۲۴) برای تعریف ضریب درگ بر روی ذره غیرکروی استفاده می‌شود [۱۰].

$$C_D = \frac{24}{Re_{sph}} (1 + b_1 Re_{sph}^{b_2}) + \frac{b_3 Re_{sph}}{b_4 + Re_{sph}} \quad (24)$$

مقادیر ثابت‌های موجود در رابطه (۲۴) عبارت‌اند از:

$$b_1 = \exp(2.3288 - 6.4581\phi + 2.4486\phi^2)$$

$$b_2 = 0.0964 + 0.5565\phi$$

$$b_3 = \exp(4.905 - 13.8944\phi + 18.4222\phi^2 - 10.2599\phi^3)$$

$$b_4 = \exp(1.4681 + 12.2584\phi - 20.7322\phi^2 + 15.8855\phi^3)$$

که در این روابط ϕ با استفاده از رابطه (۲۵) محاسبه می‌شود. در این رابطه، s مساحت جانبی کره‌ای است که همان حجم ذره را دارد، S مساحت سطح واقعی ذره است [۱۰].

$$\phi = \frac{s}{S} \quad (25)$$

بقای انرژی ذره

معادله بقای انرژی برای فاز ذرات درون گازساز به صورت رابطه (۲۶) است [۱۱].

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T - T_p) + A_p \epsilon_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) + \frac{dm_w}{dt} h_{fg} + \frac{dm_v}{dt} h_{fg} + \frac{dm_c}{dt} H \quad (26)$$

دو جمله ابتدایی در سمت راست این معادله مربوط به انتقال حرارت بین فاز جامد و سیال از طریق جابجایی و تشعشع است و عبارت‌های دیگر به ترتیب مربوط به تغییرات انرژی در فرایندهای خشک‌سازی، فرار زدایی و واکنش‌های شیمیایی ذرات جامد است. ضریب انتقال حرارت جابجایی از معادله ارائه شده توسط رنر و همکاران [۱۷ و ۱۸] مطابق با رابطه (۲۷) محاسبه می‌شود.

$$Nu = \frac{h d_p}{\lambda_g} = 2.0 + 0.6 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (27)$$

همچنین، به منظور محاسبه میزان حرارت منتقل شده از طریق تابش، دمای تابش از روابط (۲۸) به دست می‌آید [۱۵].

$$\theta_R = \left(\frac{G}{4\sigma}\right)^{\frac{1}{4}} \quad G = \int_{\Omega=4\pi} I d\Omega \quad (28)$$

اعتبارسنجی مدل با استفاده از سوخت اوریمولشن

واتانابه و همکاران، در سال ۲۰۰۲، گازی‌سازی اوریمولشن را که عبارت است از امولسیون ۷۰ درصد بیتومن در آب را بررسی کردند. مخلوط آبکی آسفالت در آب ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی شبیه به اوریمولشن دارد. بنابراین، داده‌های تجربی گازی‌سازی اوریمولشن در یک راکتور جریان حامل می‌تواند برای اعتبارسنجی مدل عددی گازی‌سازی مخلوط آسفالت-آب استفاده شوند. قبل از شبیه‌سازی سوخت آسفالت برای اطمینان از درستی مدل ایجاد شده، شبیه‌سازی سوخت اوریمولشن انجام می‌شود. مشخصات سوخت اوریمولشن در جدول ۴ آمده است.

گازساز استفاده شده (شکل ۲) برای گازی‌سازی اوریمولشن گازساز تحقیقاتی آزمایشگاهی جریان حامل به ارتفاع ۳ متر و قطر داخلی ۳۰ سانتی‌متر است. ظرفیت این گازساز ۲/۴ تن در روز بوده و این گازساز مجهز به یک نازل مخلوط‌کننده برای اتمیزه کردن سوخت با اکسیژن است. سوخت و اکسیدکننده هر دو از بالای گازساز وارد و گازهای داغ از پایین گازساز خارج می‌شوند. هندسه ساده شده این گازساز در شکل ۳ نشان داده شده است.

جدول ۴- خصوصیات اوریمولشن [۲]

Table 4- Properties of orimulsion

Proximate analysis(wet)	wt%	Ultimate analysis(dry)	wt%
Fixed carbon	12.84	C	84.28
Volatile	58.18	H	10.33
Moisture	28.8	S	3.95
Ash	0.18	O	0.55
Heating value , MJ/kg	29.77	N	0.64

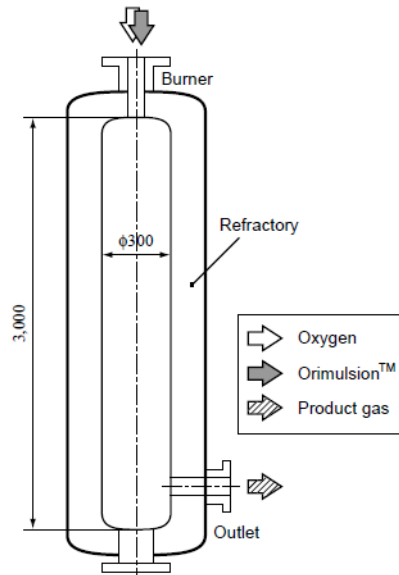


Figure 2- Experimental setup of Orimulsion gasification

شکل ۲- گازساز تجربی اوریمولشن [۵]

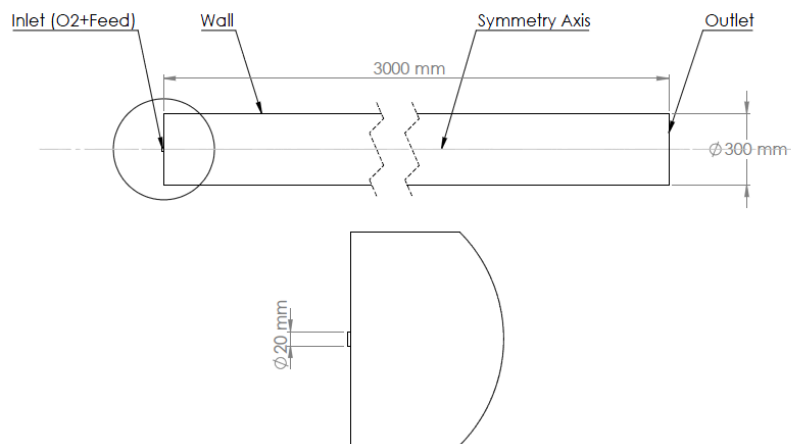


Figure 3- Geometry of Gasifier

شکل ۳- هندسه گازساز

برای ایجاد هندسه در این مقاله از نرم افزار ICEM CFD استفاده شده است. هندسه مورد نظر، همان طور که در شکل ۳ نیز آمده، یک شکل دوبعدی متقارن است که به کمک نرم افزار ذکر شده به صورت ساختاریافته با المان های چهارضلعی شبکه بندی شده است.

برای بررسی عدم وابستگی حل به شبکه‌بندی، توزیع دما بر روی محور مرکزی گازساز به‌عنوان مبنای بررسی در نظر گرفته شده و شکل ۴ توزیع دما برای مش‌های مختلف با تعداد گره‌های متفاوت را نشان می‌دهد. با توجه به نمودار به‌دست‌آمده، توزیع دما برای شبکه‌هایی با تعداد گره‌های ۲۹۵۰۰ و ۶۷۲۰۰ تفاوت چندانی بایکدیگر نداشته، که نشان‌دهنده مستقل بودن جواب از شبکه‌بندی برای شبکه‌های با تعداد گره بیشتر از ۲۹۵۰۰ است. بنابراین، برای انجام محاسبات عددی شبکه دارای ۲۹۵۰۰ گره برای شبیه‌سازی در این پژوهش انتخاب شد. شرایط مرزی جهت بررسی استقلال شبکه، فشار کاری 1.9MPa، دبی جرمی خوراک اوریمولشن 85Kg/h، دبی جرمی اکسیژن 77Kg/h، (که متناسب با نسبت هم‌ارزی 0.4 است)، قطر متوسط ذرات 30 μ m و فاکتور توزیع اندازه ذرات در توزیع روزین راملر 1.2 در نظر گرفته شده‌اند.

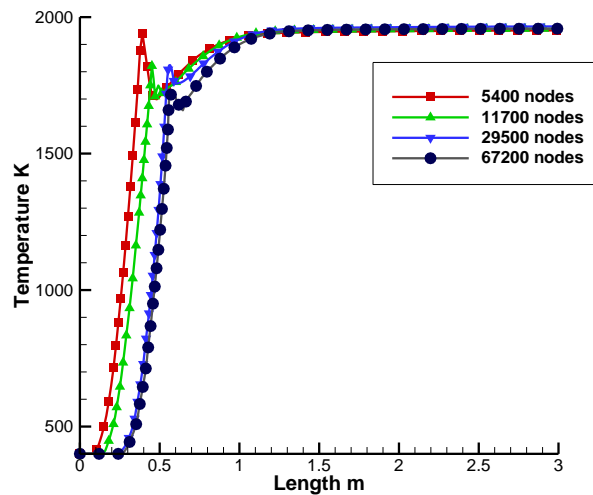


Figure 4-Independence of the mesh

شکل ۴- بررسی عدم وابستگی حل به شبکه‌بندی

در شکل ۵ کسرهای مولی گونه‌ها در خروجی گازساز با مقادیر تجربی مقایسه شده است. توافق مطلوب بین نتایج تجربی و شبیه‌سازی بیانگر این است که مدل عددی ایجادشده قادر است خصوصیات اصلی فرایند گازی‌سازی اوریمولشن را در یک راکتور جریان حامل پیش‌بینی کند. با در نظر گرفتن شباهت فرایند گازی‌سازی اوریمولشن و مخلوط آسفالت-آب [۵]، مدل ایجادشده برای پیش‌بینی گازی‌سازی آسفالت-آب نیز می‌تواند به کار گرفته شود.

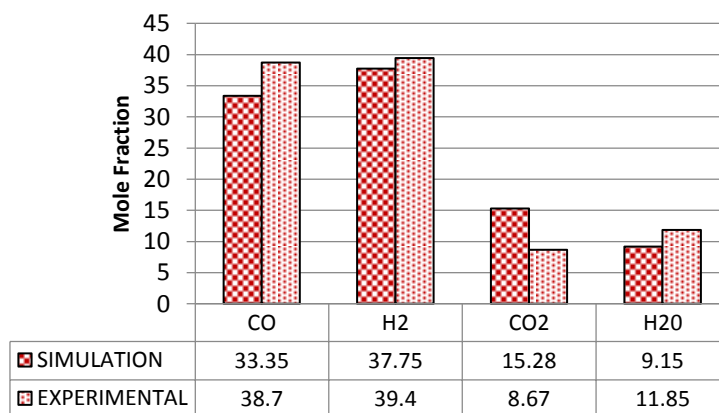


Figure 5- Comparison between simulation and experimental results (Orimulsion)

شکل ۵- مقایسه بین نتایج تجربی و شبیه‌سازی (اوریمولشن)

نتایج گازی‌سازی مخلوط آسفالت-آب

آنالیز تقریبی و نهایی آسفالت در جدول ۵ نشان داده شده است. مخلوط آبکی آسفالت-آب از ترکیب ذرات آسفالت با ۳۵٪ آب حاصل می‌شود. برای مقایسه با فرایند گازی‌سازی اوریمولشن، فرایند گازی‌سازی مخلوط آسفالت-آب در همان گازساز تحت شرایط کارکرد یکسان شبیه‌سازی می‌شود.

جدول ۵- خصوصیات آسفالت [۵]

Table 5- Properties of asphalt

Proximate analysis(wet)	wt%	Ultimate analysis(dry)	wt%
Fixed carbon	29.84	C	86.58
Volatile	69.08	H	8.53
Moisture	0.33	S	0.66
Ash	0.75	O	1.98
Heating value , MJ/kg	38.82	N	2.14

توزیع دما، سرعت و کسر مولی گونه‌ها

برای بررسی میدان دمایی، توزیع دمای داخل گازساز در شکل ۶ رسم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، دما در داخل گازساز در محدوده ابتدای آن بیشینه می‌شود. علت این امر انجام واکنش‌های گرمازا قبل از انجام واکنش‌های گازی‌سازی است که دمای بالاتری ایجاد می‌کنند. سرعت بالای واکنش‌های احتراقی باعث می‌شود که این واکنش‌ها سریع‌تر از واکنش‌های گازی‌سازی انجام شوند و انرژی موردنیاز انجام واکنش‌های گازی‌سازی را تامین نمایند. دمای بیشینه داخل گازساز ۲۸۲۰ درجه کلوین است. ناحیه آبی رنگ در شکل ۶ اکسیدکننده و خوراک ورودی است که در دمای ۴۰۰ درجه کلوین به گازساز وارد می‌شوند. نواحی قرمز رنگ و زرد رنگ نواحی انجام واکنش‌های شیمیایی است، دما در این قسمت به بیشینه مقدار خود در طی فرایند گازی‌سازی می‌رسد.

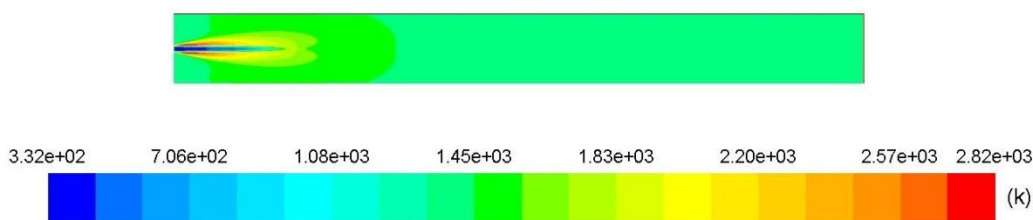


Figure 6- Contours of temperature asphalt slurry (°K)

شکل ۶- توزیع دما آسفالت آبکی (درجه کلوین)

در شکل ۷، توزیع سرعت ذرات آسفالت نشان داده شده است. از طریق یک نازل مخلوط آبکی آسفالت به کمک اکسیژن خالص ورودی متمایز می‌شود. این تزریق باعث ایجاد یک ناحیه جریان جت با سرعت بالا در ابتدای محفظه گازساز می‌شود. با توجه به فشار کاری ۱۹ بار، بیشینه سرعت ۴/۹۴ متر بر ثانیه در ناحیه ورودی ایجاد می‌شود. شکل‌های ۸ تا ۱۱ توزیع گونه‌های H_2O ، CO ، H_2 و CO_2 را در داخل محفظه گازساز نشان می‌دهند. H_2O و CO_2 محصولات احتراق‌اند و غلظت آن‌ها در منطقه احتراق، یعنی جایی که دما بیشینه است، بیشترین مقدار را دارد. از طرفی، گازهای H_2 و CO محصولات واکنش‌های گازی‌سازی‌اند و مقدار این گازها در ناحیه انجام واکنش‌های احتراقی ناچیز است.

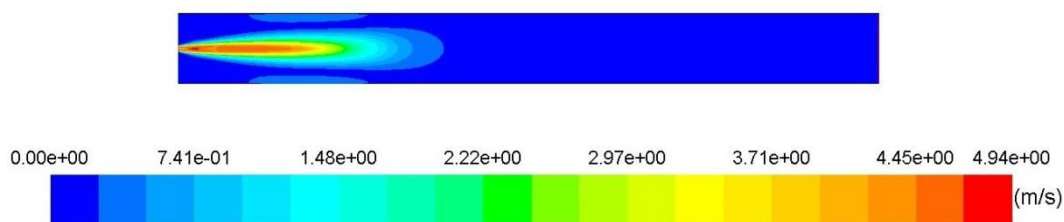


Figure 7- Contours of velocity magnitude asphalt slurry (m/s)
شکل ۷- توزیع سرعت آسفالت آبکی (متر بر ثانیه)

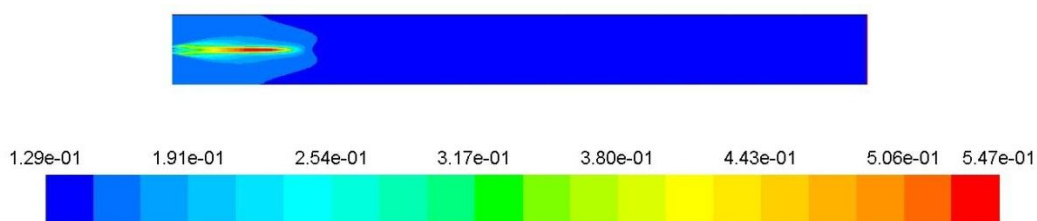


Figure 8- Contours of mole fraction of CO2
شکل ۸- توزیع کسر مولی گونه‌های CO2

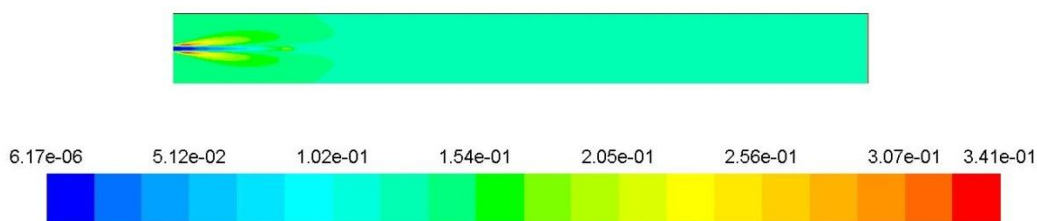


Figure 9- Contours of mole fraction of H2O
شکل ۹- توزیع کسر مولی گونه‌های H2O

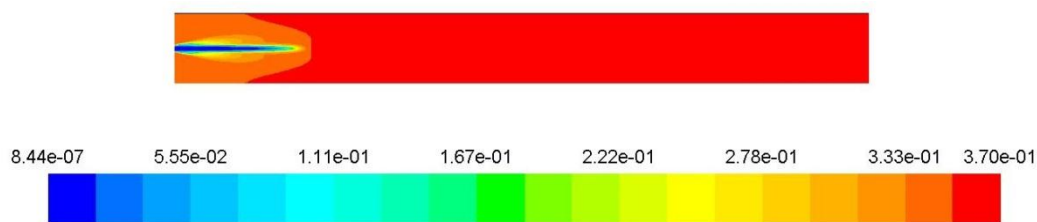


Figure 10- Contours of mole fraction of CO
شکل ۱۰- توزیع کسر مولی گونه‌های CO

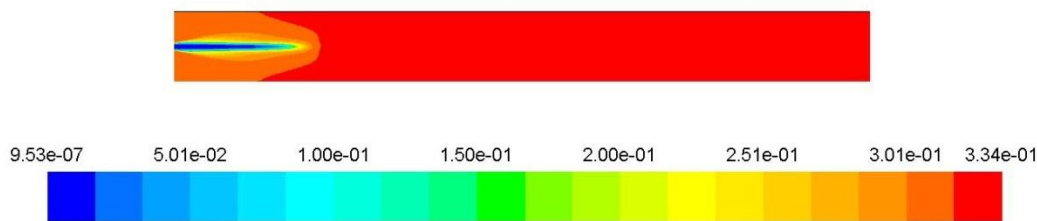


Figure 11- Contours of mole fraction of H2
شکل ۱۱- توزیع کسر مولی گونه‌های H2

تاثیر مدل‌های مختلف فرارزدایی

در شکل ۱۲، توزیع کسر مولی گاز سنتز بر روی محور مرکزی گازساز برای مدل‌های مختلف فرارزدایی نمایش داده شده است. با توجه به نمودارها نتیجه می‌شود که مدل دونرخی کوبایاشی مقدار CO کمتری را نسبت به سایر مدل‌ها پیش‌بینی می‌کند. اما، درخصوص مقادیر H₂ و CO₂ نسبت به سایر مدل‌ها مقادیر بیشتری را پیش‌بینی می‌کند. همچنین، مشاهده می‌شود نتایج مدل نرخ ثابت شبیه به نتایج مدل‌های دیگر است که نشان می‌دهد عدد ثابت لحاظ‌شده برای مدل فرارزدایی با نرخ ثابت مقدار مناسبی دارد.

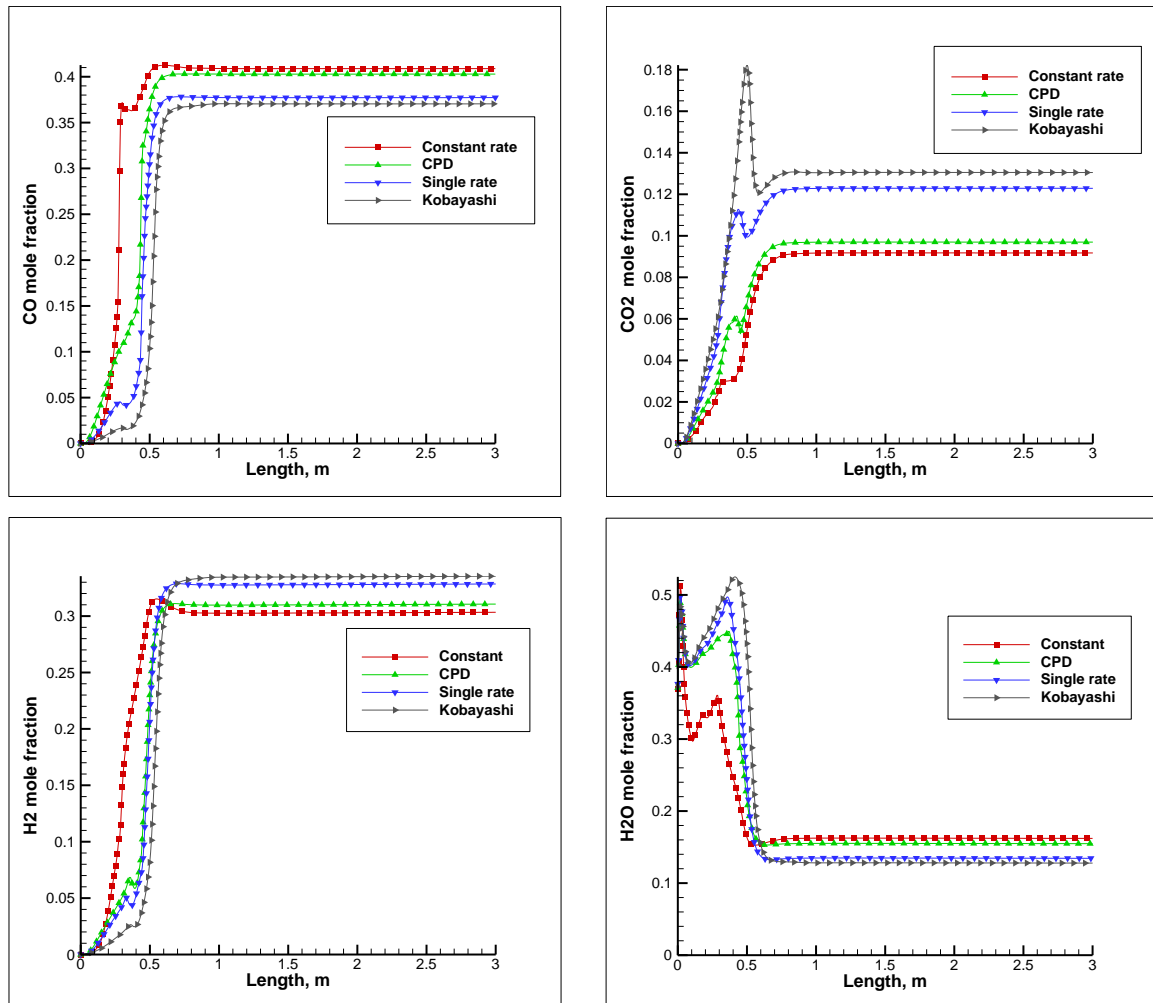


Figure 12- Species mole fraction distribution on gasifier central axis

شکل ۱۲- توزیع کسر مولی گاز سنتز بر روی محور مرکزی گازساز

بررسی اثر اندازه ذرات فاز گسسته

توزیع اندازه ذرات خوراک ورودی به محفظه گازساز در شرایط کارکرد واقعی غیریکنواخت (با قطرهای مختلف) است. به همین دلیل، برای نزدیک شدن به شرایط کارکرد واقعی گازساز در شبیه‌سازی از توزیع روزین راملر استفاده می‌شود. ولی، برای درک بهتر تاثیر اندازه ذرات فرض می‌شود که ذرات با اندازه‌های یکسان در داخل گازساز توزیع می‌شوند. در این خصوص ذرات با

چهار قطر مختلف ۲۵، ۵۰، ۷۵ و ۱۰۰ میکرومتر بررسی می‌شوند. در شکل ۱۳، اثر اندازه ذرات فاز جامد بر روی توزیع کسر مولی گاز سنتز بر روی محور مرکزی گازساز نشان داده شده است. با توجه به شکل ۱۳، با افزایش اندازه قطر ذرات کسر مولی CO ، H_2O کاهش و کسر مولی CO_2 ، H_2 افزایش می‌یابد. افزایش مقدار گاز CO_2 بیانگر انجام بیشتر واکنش‌های احتراقی است که منجر به کاهش بازده گازی‌سازی می‌شود. با توجه به شکل ۱۳، مقادیر توزیع کسرهای مولی گازهای H_2O ، H_2 ، CO_2 ، CO با توزیع ذرات روزین راملر با قطر متوسط ۴۳ میکرومتر، نزدیک به مقادیر توزیع کسرهای مولی گازهای فوق برای ذرات با قطرهای ۵۰ و ۷۵ میکرونی است.

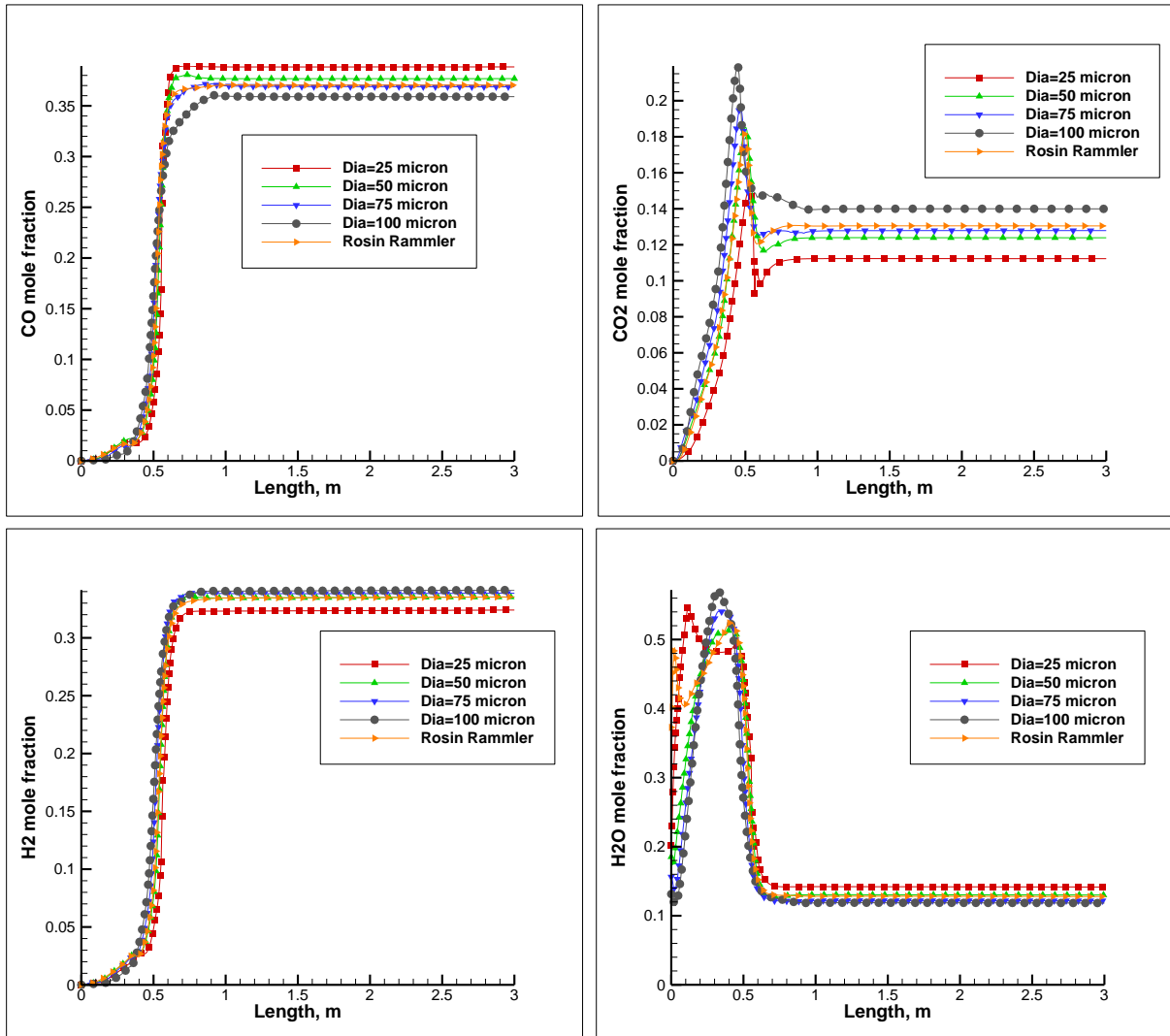


Figure 13- Species mole fraction distribution on gasifier central axis
شکل ۱۳- توزیع کسر مولی گاز سنتز بر روی محور مرکزی گازساز

بررسی اثر غیرکروی بودن ذره فاز گسسته بر روی پارامترهای گازی‌سازی

برای بررسی گازی‌سازی خوراک آسفالت تا به حال شکل ذره به صورت کروی در نظر گرفته شده است. در این تحقیق، برای اولین بار، ذره غیرکروی در شبیه‌سازی آسفالت در نظر گرفته می‌شود و تاثیر آن بر روی پارامترهای گازی‌سازی بررسی می‌شود.

همان‌طور که در نمودار ۱۴-الف مشاهده می‌شود، کاهش فاکتور شکل (فاصله‌گرفتن شکل ذره از حالت کروی) باعث افزایش جزئی درجه حرارت می‌شود. همچنین، بیشینه دما در فاصله نزدیک‌تری نسبت به ورودی گازساز اتفاق می‌افتد. این تغییرات برای فاکتور شکل ۰/۱، که بیانگر بیشترین مقدار غیرکروی بودن ذره است، بیشتر مشهود است. اثر شکل ذره بر روی پارامترهای گازی‌سازی باید برای ذرات بزرگ‌تر نسبت به ذرات کوچک‌تر بیشتر آشکار باشد. ذرات بزرگ که دمای داخلی و گرادیان‌های تجزیه قابل توجهی را در خود حفظ می‌کنند، حرارت و جرم را در نرخ‌هایی متناسب با مساحت سطح خود انتقال می‌دهند. کره کمترین نسبت سطح به حجم را در میان شکل‌های هندسی مختلف دارد، بنابراین، نرخ انتقال حرارت و جرم در یک ذره کروی شکل نسبت به ذره غیرکروی شکل (با همان نسبت حجم به جرم) کمتر است. در مقابل ذرات با مقدار کم یا بدون دمای داخلی و گرادیان‌های تجزیه، گرما و جرم را با نرخ‌هایی متناسب با حجم کلی خود انتقال می‌دهند. بنابراین، ذرات کروی شکل نسبت به ذرات غیر کروی آهسته‌تر واکنش می‌دهند. مطابق نمودار ۱۴-الف، هر چه ذره از شکل کره فاصله می‌گیرد دما افزایش و بیشینه دما به دهانه ورودی نزدیک‌تر می‌شود. مطابق نمودار ۱۴-الف، منحنی توزیع دمای مربوط به ذره کروی و ذره غیرکروی با فاکتور شکل یک برهم منطبق‌اند. چون فاکتور شکل یک همان ذره کروی را مدل‌سازی می‌کند.

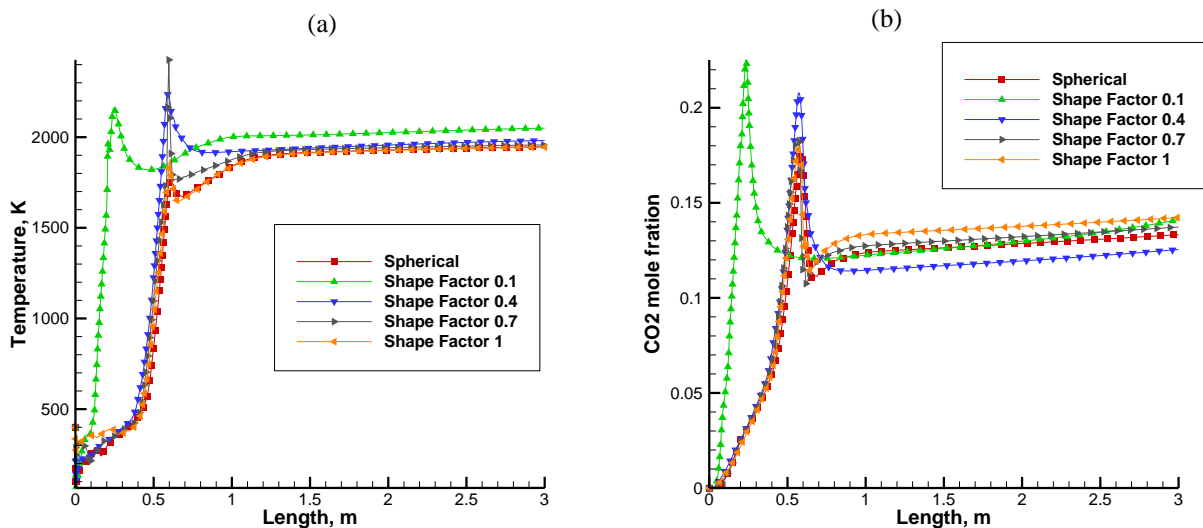


Figure 14- Temperature and CO₂ mole fraction distribution on gasifier central axis

شکل ۱۴- توزیع دما و کسر مولی CO₂ بر روی محور مرکزی گازساز

در نمودار ۱۴-ب، کسر مولی CO₂ در داخل محفظه گازساز، همان‌طور که در نمودار ۱۴-الف نیز توضیح داده شد، در فاکتور شکل یک و در جایی که دما بیشینه است بیشترین مقدار را دارد. به عبارت دیگر، چون دمای بیشتر در این منطقه نشان‌دهنده احتراق بیشتر است، دی‌اکسیدکربن که محصول احتراق است، در این منطقه بیشتر تولید می‌شود. همان‌طور که در نمودار ۱۵-الف مشاهده می‌شود، کمترین مقدار CO مربوط به فاکتور شکل ۰/۱ و بیشترین مقدار آن مربوط به فاکتور شکل ۰/۴ است. مقدار تخمین‌زده‌شده توسط ذره کروی نزدیک به مقادیر مربوط به فاکتور شکل‌های ۰/۷، ۰/۱ و ۱ است. مانند نمودارهای پیشین در نمودار ۱۵-الف هم مقدار CO در فاکتور شکل ۰/۱ زودتر از مابقی خطوط بیشینه می‌شود. ولی، بیشینه آن از مقدار بیشینه فاکتورهای شکل دیگر کمتر است. به عبارت دیگر، محصول گازی‌سازی است و در جایی که واکنش‌های احتراقی بیشتراند محصولات گازی‌سازی کمتر است.

تغییر نوع ذره از کروی به غیرکروی کمترین تاثیر را بر روی تولید H_2 دارد. همان طور که در نمودار ۱۵-ب ملاحظه می شود، خطوط نمودار تقریباً در انتها بر روی یکدیگر منطبق شده اند. با نگاهی دقیق تر مشخص می شود که بیشترین مقدار تولید H_2 مربوط به فاکتور شکل یک و کمترین مقدار آن مربوط به فاکتور شکل ۰/۱ است.

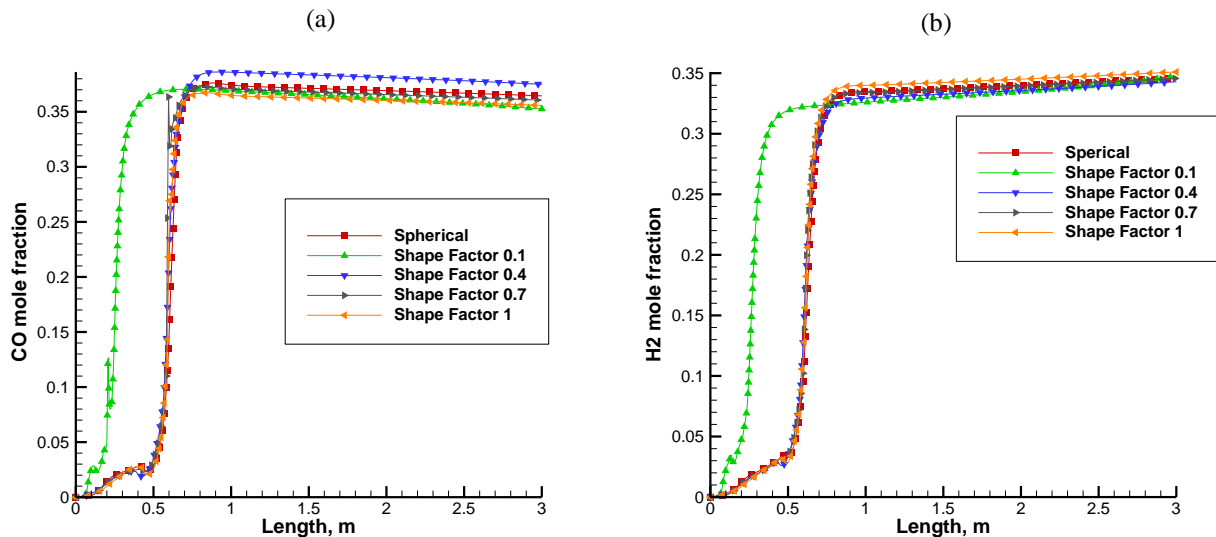


Figure 15- CO and H₂ mole fraction distribution on gasifier central axis

شکل ۱۵- توزیع کسر مولی CO و H₂ بر روی محور مرکزی گازساز

جمع بندی و نتیجه گیری

در مقاله حاضر، گازی سازی مخلوط آبکی آسفالت (۶۵٪ آسفالت+۳۵٪ آب) در یک گازساز جریان حامل تک مرحله ای تحت فشار به کمک نرم افزار انسیس فلونت نسخه ۱۵ به صورت عددی شبیه سازی شده و نتایج آن با داده های آزمایشگاهی و عددی مقایسه شده است. در این مساله فرضیاتی از قبیل هندسه دو بعدی، پایابودن جریان، استفاده از سینتیک شیمیایی، مخلوط همگن آسفالت-آب، مخلوط گازها به صورت گاز ایدئال در نظر گرفته شده است. خوراک آسفالت آبکی با عامل گازی سازی اکسیژن با دمای ۴۰۰ درجه کلوین از طریق یک نازل با قطر ۲۰ میلی متر وارد گازساز جریان حامل می شود. معادلات ناویر استوکس دوبعدی و معادلات انتقال برای ده گونه به همراه سه واکنش کلی ناهمگن و هفت واکنش همگن و یک واکنش تجزیه حرارتی ماده فرار حل شد. با استناد به نتایج تحقیقات واتانابه و همکاران، در این پژوهش، برای نسبت هم آری مقدار ۰/۴ لحاظ شد. واکنش های همگن و ناهمگن مورد نیاز از منابع موجود انتخاب و ثابت های سینتیکی در نرم افزار تعریف شدند. با توجه به اهمیت مقدار دقیق دبی جرمی در ورودی از شرط مرزی جریان جرمی در ورودی و از فشار خروجی برای مرز خروجی استفاده شده است. هدف اصلی در این پژوهش محاسبه پارامترهای گازی سازی خوراک آسفالت آبکی مانند میدان سرعت، دما، توزیع کسر مولی گونه های گاز سنتز، و همچنین بررسی اثر مدل های مختلف فرارزدایی و اندازه ذرات فاز گسسته بود. همچنین، در این پژوهش، برای اولین بار به کمک شبیه سازی عددی تاثیر استفاده از ذرات غیر کروی فاز جامد بر روی پارامترهای گازی سازی مخلوط آبکی آسفالت بررسی شد. نتایج شبیه سازی نشان داد تغییر شکل ذره از کروی به غیرکروی بر روی مقدار و توزیع دما در داخل گازساز تاثیر می گذارد، به طوری که بیشینه دما به جای فاصله نیم متری در فاصله تقریباً سی سانتی متری ابتدای گازساز ایجاد می شود. همچنین، کاهش فاکتور شکل باعث افزایش جزئی درجه حرارت روی محور مرکزی گازساز می شود، که این تغییر برای فاکتور شکل ۰/۱، که بیانگر بیشترین مقدار تفاوت در شکل ذره است، بیشتر مشهود است.

در صورت استفاده از ذرات غیرکروی بیشترین مقدار توزیع کسر مولی CO₂ مربوط به فاکتور شکل یک و کمترین مقدار آن مربوط به فاکتور شکل ۰/۴ است. توزیع کسر مولی CO₂ برای فاکتور شکل ۰/۱ در جایی که دما بیشینه است بیشترین مقدار را دارد. بعبارت دیگر، چون دمای بیشتر نشان دهنده احتراق بیشتر است، پس دی اکسید کربن، که محصول احتراق است، بیشتر تولید می شود. در صورت استفاده از ذرات غیر کروی، کمترین مقدار CO مربوط به فاکتور شکل ۰/۱ و بیشترین مقدار آن مربوط به فاکتور شکل ۰/۴ است. مقدار CO در فاکتور شکل ۰/۱ زودتر از مابقی خطوط بیشینه می شود، ولی بیشینه آن از مقدار بیشینه فاکتورهای شکل دیگر کمتر است. تغییر نوع ذره از کروی به غیرکروی کمترین تاثیر را بر روی تولید H₂ دارد. با توجه به نتایج به دست آمده می توان گفت که مخلوط آبکی آسفالت می تواند یک خوراک خوب برای گازی سازی باشد.

فهرست علائم

S_m	ترم چشمه ناشی از تبادل جرم	a_p	جذب معادل ذره
v	سرعت (m/s)	P	زیر نویس نشان دهنده ذره
P	فشار (Pa)	F_D	نیروی درگ
g	شتاب جاذبه (9.81 m/s ²)	C_D	ضریب درگ
F	نیرو (N)	n	پارامتر پخش ذرات
I	ماتریس واحد	A	فاکتور پیش نمایی
T	دما (K)	E	انرژی فعال سازی
K	ضریب هدایت گرمایی (W/m.K)	m_v	جرم ماده فرار
h	آنتالپی (kJ/kg)	m_a	جرم خاکستر
Y	کسر جرمی گونه	k_c	ضریب انتقال جرم
J	شار پخش گونه (mol/m ² .s)	C_s	غلظت بخار در سطح ذره
R	ثابت جهانی گاز (8.314 kJ/kmol.K)، نرخ تولید و تجزیه گونه	C_{∞}	غلظت بخار در جریان سیال
Sc_t	عدد اشمیت آشفستگی (بی بعد)	Sh	عدد شروود
$D_{i,m}$	دیفیوژن جرمی گونه	h_{fg}	گرمای نهان تبخیر (kJ/kg)
$D_{T,i}$	دیفیوژن حرارتی گونه	c_p	ظرفیت حرارتی ویژه
Re_{ij}	تنش رینولدز	h	ضریب انتقال حرارت جابجایی
k	انرژی سینتیک آشفستگی	Nu	عدد ناسلت
G_k	نرخ تولید انرژی جنبشی آشفستگی	Pr	عدد پرائنتل
S	قدرمطلق متوسط تانسور نرخ کرنش	A	مساحت (m ²)
q_r	شار حرارتی تابشی	p_n	فشار جزیی
G	تابش برخورد کننده به سطح	$M_{w,i}$	جرم مولکولی گونه
A	ضریب جذب	$C_{j,r}$	غلظت گونه

منابع

1. J. Rezaian, N. P. Cheremisnoff, *Gasification Technologies A Primer for Engineers and Scientists*, Boca Raton, Florida, CRC press, Taylor & Francis Group, 2005
2. H. Watanabe, M. Otaka, S. Hara, M. Ashizawa, K. Kidoguchi, J. Inumaru, "Modelling and simulation for extra heavy oil gasification on entrained flow gasifier," in *international joint power generation*, Phoenix, USA, 2002.

3. M. Ashizawa, S. Hara, K. Kidoguchi, J. Inumaru, "Gasification characteristics of extra-heavy oil in a research-scale gasifier," *Energy*, vol. 30, no. 11, 2005, pp. 2194-2205.
4. M. Banisaeed, A. Rezaee-Manesh, "A parametric study for gasification of liquid fuels," *PETROLEUM SCIENCE AND TECHNOLOGY*, 34, 2016, pp. 976-979.
5. L. Xingying, Z. Hanbin, G. Jinsen, "CFD simulation on the gasification of asphalt water slurry in a entrained gasifier" *Pet.Sci.*, 11, pp. 308-317, 2014.
6. W. P. Jones, R. P. Lindstedt "Global reaction schemes for hydrocarbon combustion," *Combustion and flame*, 73, 3, 1988, pp. 233-249.
7. C. K. Westbrook, F. L. Dryer, "Simplified reaction mechanism for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames," *Combustion Science and Technology*, 27, 1-2, 1981, pp. 31-34.
8. F. Bustamante, R. M. Enick, R. P. Killmeyer, et al. "Uncatalyzed and wall catalyzed forward water-gas shift reaction kinetics", *AIChE Journal*, 51, 5, 2005, pp.1440-1454
9. A. Silaen, T. Wang, "Effect of turbulence and devolatilization models on coal gasification simulation in an entrained-flow gasifier," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53, 9-10, 2010, pp. 2074-2091.
10. Ansys Fluent 15.0 Theory Guide, 2013.
11. X. Gao, Y. Zhang, B. Li, X. Yu, "Model development for biomass gasification in an entrained flow gasifier using intrinsic reaction rate submodel," *Energy Conversion and Management* 108, 1, 2016, pp. 120-131.
12. D. J. Harris, I. W. Smith. "Intrinsic reactivity of petroleum coke and brown coal char to carbon dioxide steam and oxygen," *Symposium (International) on Combustion*, Elsevier, 23,1, 1991, PP. 1185-1190
13. V. Sreedharan, "CFD Analysis of Coal and Heavy Oil Gasification for Syngas Production," Aalborg University, 2012.
14. I. W. Smith "The combustion rates of coal chars: a review," *19th Symposium on Combustion*, 19, 1, 1982, pp. 1045-1065.
15. Y. Luan, Y. Chyou, T. Wang, "Numerical analysis of gasification performance via finite-rate model in a cross-type two-stage gasifier," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 57, 2, 2013, pp. 558-566.
16. S. A. Morsi, A. J. Alexander, "An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow Systems," *Journal of Fluid Mechanics*, 55, 2, 1972, pp. 193-208.
17. J. W. E. Ranz, W. R. Marshall, "Vaporation from drops, Part I," *Chemical Engineering Program*, 48, 3, 1952, pp. 141-146.
18. J. W. E. Ranz, W. R. Marshall, "Evaporation from drops, Part I and Part II," *Chemical Engineering Program*, 48, 4, 1952, pp. 173-180.

English Abstract

Numerical simulation of asphalt water slurry gasification process in an entrained flow gasifier

Hossein Mahdavy-Moghaddam^{1*} and Kamran Yousefi²

1- Department of Aerospace Engineering, University of K. N. Toosi, Iran, mahdavy@kntu.ac.ir

2- Department of Mechanical & Aerospace Engineering, University of I. Azad, Science & Research Branch,

Kamran.ysfm@gmail.com

*Corresponding author

(Received: 2018. 7.16, Received in revised form: 2018.11.6, Accepted: 2018.11.23)

In this paper, numerical simulation of asphalt water slurry gasification process as a heavy fuel oil in a single stage gasifier, using the commercial Ansys fluent software, in a two-dimensional geometry And based on the Eulerian-Lagrangian approach has been done. In this simulation, the distribution of velocity, temperature distribution and molar fraction distribution of synthesis gas species have been calculated. The effect of different devolatilization models, the discrete phase particle size on gasification, and also for the first time, the effect of the use of discrete phase non-spherical particles on gasification parameters has been investigated. The results of this study showed that the water mixture of asphalt can be considered as a suitable feed for gasification. In the study of non-spherical particles it was also found that if the particles with a shape factor of 0.1, which have the greatest difference with spherical particles, are used, the temperature of the chamber slightly increases and the maximum temperature is more distant than the feed intake.

Keywords: heavy fuels oil, Entrained flow, gasification, discrete phase