

行政院原子能委員會
委託研究計畫研究報告

整合式氣化程序模擬模型開發研究

**Development of the simulation model of an integrated gasification
process**

計畫編號：1002001INER058

受委託機關(構)：國立成功大學航空太空工程研究所

計畫主持人：江滄柳

聯絡電話：06-2757575-63676

E-mail address：jiang@mail.ncku.edu.tw

核研所聯絡人員：陳銘宏

報告日期： 100 年 12 月 06 日

目 錄

圖目錄.....	II
表目錄.....	IV
誌謝.....	V
中文摘要.....	VI
ABSTRACT.....	VII
壹、計畫緣起與目的.....	1
一、研究背景.....	1
二、氣化方式與原理.....	5
貳、文獻回顧.....	10
參、研究方法與過程.....	29
一、連續相-守恆方程式.....	29
二、分離相-傳輸方程式.....	32
三、煤粒之相關性質.....	37
四、操作參數分析.....	40
五、FLUENT 結合 CHEMKIN 之運算模式.....	42
六、氣化爐-幾何尺寸與入口條件.....	49
肆、主要發現與結果討論.....	51
一、修正 Steady-Flamelet 模型之加水測試.....	51
二、出口成份結果與比較.....	53
三、氣化爐分段進料之氣化效能評估.....	59
四、不同煤種之氣化效能分析.....	62
五、EDC+CHEMKIN 之基礎模型.....	64
六、EDC 之+ISAT 之結果比較.....	66
伍、結論.....	77
參考文獻.....	80

圖目錄

圖 1- 1.整合型氣化複循環發電系統[8].....	3
圖 1- 2.整合型氣化複循環燃料電池系統[9].....	4
圖 1- 3.單煤粒受熱分解示意圖[19].....	6
圖 1- 4.三種典型氣化爐示意圖[17].....	7
圖 3- 1. 粒子直徑與粒子之質量分率之關係圖	34
圖 3- 2. 煤炭計算器之計算去揮發化物質示意圖	43
圖 3- 3.EDC 模型結合 CHEMKIN 反應機制之介面圖.....	45
圖 3- 4.EDC-ISAT 之 INTEGRATION METHOD 圖.....	46
圖 3- 5.EDC 之 SPECIES MODEL 介面圖.....	48
圖 3- 6. 氣化爐外觀示意圖與相關尺寸 [60].....	50
圖 4- 1. 不同煤炭含水比例之出口成份比較圖	51
圖 4- 2. 不同添加水比例之出口溫度比較圖	53
圖 4- 3. 網格測試之出口成份結果比較圖	53
圖 4- 4. 網格測試之出口溫度結果比較圖	54
圖 4- 5. 出口成份與實驗結果 [65] 比對.....	54
圖 4- 6. 氣化爐沿軸向之溫度分佈圖	55
圖 4- 7. 氣化爐沿軸向之氧氣分佈圖	56
圖 4- 8. 氣化爐沿軸向之水蒸氣分佈圖	57
圖 4- 9. 氣化爐沿軸向之一氧化碳分佈圖	58
圖 4- 10. 氣化爐沿軸向之氫氣分佈圖	59
圖 4- 11. 二級式進料之出口成份比較圖	60

圖 4- 12. 二級式進料氣化爐之內部溫度分布圖	61
圖 4- 13. 二級式進料氣化爐之內部成份比較圖	62
圖 4- 14.不同煤種之出口成份及溫度圖	63
圖 4- 15.採用(A)大陸神華煤，(B)MONTANA 煤，(C)PITTSBURGH 煤 進行氣化之爐內氫氣分佈圖	63
圖 4- 16. FLUENT 匯入 CHEMKIN 反應機制之介面圖	65
圖 4- 17. EDC 模型之流場與紊流固定和開啟示意圖	66
圖 4- 18.反應式前之 EDC 結果	67
圖 4-19.暫時修正為氣相進料之設定圖	68
圖 4- 20.EDC 出口結果圖.....	70
圖 4- 21.氣化爐沿軸向之溫度分佈圖	71
圖 4- 22.氣化爐沿軸向之氧氣分佈圖	71
圖 4- 23.氣化爐沿軸向之水蒸氣分佈圖	72
圖 4- 24.氣化爐沿軸向之二氧化碳分佈圖	72
圖 4- 25.氣化爐沿軸向之一氧化碳分佈圖	73
圖 4- 26.氣化爐沿軸向之氫氣分佈圖	74

表目錄

表 1- 1. 煤炭氣化發電之能源優勢[15].....	4
表 3- 1. 煤粒相關性質.....	37
表 3- 2. 煤成份之元素分析與工業分析	38
表 3- 3. 煤粒之粒徑分佈.....	39
表 3- 4. MONTANA ROSEBUD COAL 成份之元素分析與工業分析[70]	39
表 4- 1.FLUENT 內氣相反應式單位	68
表 4- 2.FLUENT 內異(固)相反應式單位	68
表 4- 3.參考文獻換算後之反應參數值	69

誌謝

本研究計畫乃由行政院原子能委員會核能研究所補助經費(1002001INER058)。計畫執行中，承蒙核研所相關同仁之支持、指導及協助，方得以順利完成，謹此誌謝。

中文摘要

本研究已建立一整合 FLUENT 計算流體力學軟體及 CHEMKIN 化學反應動力機制之三維數值計算模式。並以挾帶床氣化爐為研究目標，建立一包含化學動力反應機制之多相紊流反應數值分析模式。氣化相關模式乃是從相關文獻選取八條同/異相化學反應式以評估氣化相關反應之行為，並與實驗結果進行比對。而在與實驗結果比對中可發現，本研究所新建立之去揮發化物質 $C_{11}H_{24}O_5$ ，搭配 FLUENT-CHEMKIN-Flamelet 模型，已能夠模擬出挾帶床式氣化爐之主要反應現象。其模擬結果比修正前模型誤差與精準度皆改善許多，出口成份與實驗之相對誤差值由 3.15% 改善為 1.52%。採用此模型進行 Montana 煤、大陸神華煤及 Pittsburgh 煤分析測試，結果發現出口之二氧化碳量比例以 Montana 煤為最低。另一方面，為了更詳盡的探討在氣化爐中，化學反應機制在多相紊流反應數值分析之影響，本研究導入 EDC(Eddy Dissipation Concept) 結合 CHEMKIN 化學反應機制運算軟體之模型進行分析。其 EDC+CHEMKIN 之基礎模型及運算程序已建立，且模擬結果與實驗值趨勢一致。唯目前分析之出口成份相對誤差在 7.4% 左右，後續將進行模型精進工作，以獲得更精準之數值分析模型。

關鍵字：FLUENT-CHEMKIN-Flamelet、挾帶床氣化爐、EDC

Abstract

A three-dimensional numerical model for the coal combustion and gasification of an entrained-bed gasification reactor has been developed by integrating the commercial computational fluid dynamic software FLUENT with the detailed kinetics modeling software CHEMKIN. Eight homogeneous and heterogeneous reaction mechanisms were considered for the combustion and gasification processes. A new volatile species ($C_{11}H_{24}O_5$) was considered in the proposed FLUENT-CHEMKIN-Flamelet model. Consistent trend with experimental results was observed via the proposed model. The results are better than those of the previously developed model. The difference with experimental results is modified from 3.15% to 1.52%. This model was employed to evaluate the effect of coal type on the gasification performance. The results show that the CO_2 production of the Montana coal is the lowest. In order to study the numerical analysis in gasification with detailed chemistry reaction mechanism in multi-phase turbulent combustion, the EDC (Eddy Dissipation Concept) model integrating the kinetics modeling software CHEMKIN was employed. The EDC+CHEMKIN model and the computational procedure have been established. Although the trend by the EDC-CHEMKIN model is consistent with experimental data, the difference is (about~7.4%). Further modification will be conducted to improve the proposed model.

Keywords: FLUENT-CHEMKIN-Flamelet, entrained-bed gasifier, EDC

壹、計畫緣起與目的

一、研究背景

在化石能源日益減少，科技發展腳步不曾終止且更加快速，這迫使人類開始積極尋找新的替代能源，並兼顧減少對環境之衝擊。1973年及1979年發生了第一次及第二次的能源危機，能源之開發與管理已成為各國工業發展之重要課題[1-3]。近年來石油及天然氣價格，因儲量日近匱乏而節節高升。倘若每年石油之消耗量不減，未來五十年內，石油耗盡將是不可避免之結果。根據 BP Statistical Review of World Energy 2011 調查報告指出，煤炭為全球蘊藏量最豐富之化石能源，其藏量/消耗比率為118年，遠高於天然氣的50年與石油的40年[4]，這意味著煤炭將會成為能量的主要來源。相較於前二者，煤炭具有下面幾個優點：(1)價格便宜；(2)開採容易、儲量豐富，約有一百多年可開採；(3)粉煤使用效率不斷提高；(4)可作為化工原料，用途廣泛[5, 6]。以我國為例，能源利用煤炭的供給比例從1988年的24.86%提高至2009年的30.45%，平均年成長率約為6.61% [7]。但目前燃燒煤炭最大之問題便是會產生高溫混合氣體，且其中包括二氧化碳、硫化物及氮氧化物，將造成全球暖化，對環境產生重大衝擊。抑制全球暖化現象現已成國際間重要的課題，如1997年12月，於日本京都簽訂「京都議定書(Kyoto Protocol)」，即明確規範工業國家溫室氣體之

減量目標。有鑑於此，各國皆積極進行淨煤技術(Clean Coal Technology)之發展，以符合環保與經濟並重之雙重要求。

所謂淨煤技術，旨在最大限度之開發煤炭作為能源之運用，同時又能達成最少污染物釋放，進而完成煤炭高效、淨潔使用之目標。較典型之淨煤技術包括流體化床煤燃燒(PFBC, Pressurized Circulating Fluidized Bed)、超臨界粉煤鍋爐發電(SCPC, Super Critical Pulverized Coal)、整合型氣化複循環發電(IGCC, Integrated Gasification Combined Cycle)、整合型氣化複循環燃料電池(IGFC, Integrated Gasification Fuel Cell)等技術。其中 IGCC 系統之概念圖如圖 1-1[8]所示，而氣化燃氣複循環燃料電池 IGFC(Integrated Gasification Fuel Cell)系統之概念圖，如圖 1-2[9]所示。IGCC 是較先進之發電技術，具有發電效率高和淨潔燃料等優點，可使發電之淨熱效率增加至 43%(HHV)左右[10, 11]。

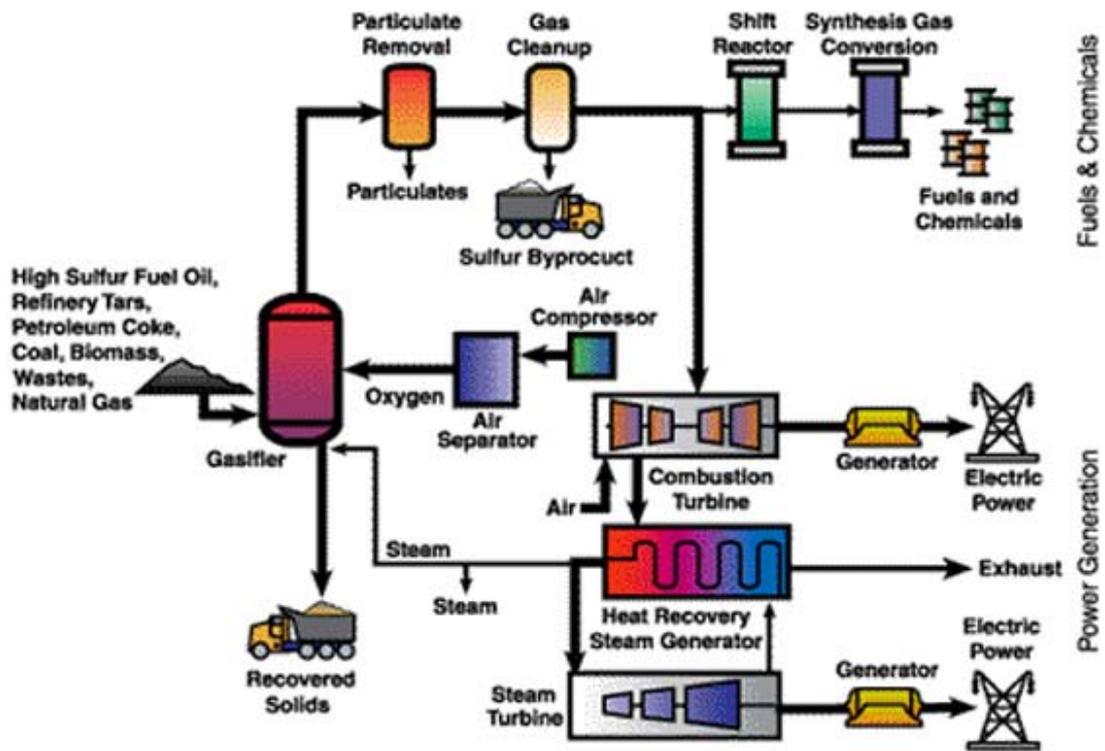


圖 1-1. 整合型氣化複循環發電系統[8]

隨著高效率渦輪機之商業化運轉成功，預期未來整廠效率可望提高到 50%(HHV) 以上。而結合燃料電池(IGFC)更可將效率提昇至 60%(HHV)。根據美國能源部推估，在 2015 年將完成先進動力系統之研發，並能夠達到 45~50%之發電效率，且成本為\$1,600/kW 以下，較典型燃煤電廠為低[12]。此外，粉煤氣化其除硫率及除氮率約達 90% 及 99%，煤中之灰份形成無污染顧慮之溶渣(Slag) 排出，去除 SO_x、NO_x 較傳統燃煤發電機組容易且設備體積較小，廢水及溫排水量較少，CO₂ 排放量較低；所以造成之環境污染很少，對煤質的要求也較低，低品位的煤炭亦可使用，可降低發電成本[13, 14]。

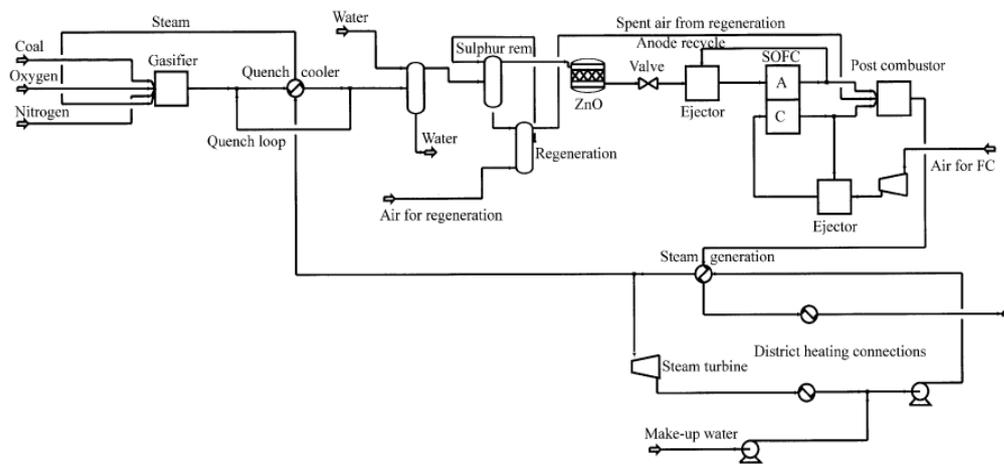


圖 1-2. 整合型氣化複循環燃料電池系統[9]

就國內目前的電廠狀況而言，由於興建新的核能電廠不易，再生能源的發展也未成熟，電力的主要來源仍以火力發電為主。在燃煤電廠方面，不但須耗費極大成本處理污染問題。煤礦的採購亦受到限於發電機組的適用性，僅能選擇較好的煤種。因此，為了避免因燃燒煤種、相關環保及營運成本等問題之衍生，在煤炭氣化發電的評估與設立計畫，實為刻不容緩。表 1-1 為煤炭發電之綜合比較[15]。

表 1-1. 煤炭氣化發電之能源優勢[15]

技術分類	次臨界 PC/FGD/LNB	超臨界 PC/FGD/SCR	PFBC/CC	IGCC
電廠效率(%， LHV)	34~36	37~39	40~42	41~43
目前			48~50	48~52
2010 年				
污染排放(%)	比較基準			
SO _x	100	100	110~120	10~20
NO _x	100	20~30	45~55	5~10
CO ₂	100	85~95	85~95	80~90
固態廢物	100	100	100~500	40~65
粉塵排放	100	100	100	40~50
建廠成本(US\$/KW)				
目前	900~1000	1000~1200	1400~1600	1200~1700
2010 年			1100~1300	1000~1100
發電成本(¢/KWh)			-	
目前	3.69	3.76		3.76
2010 年				3.38

註：以美國建廠與運轉成本估算

二、氣化方式與原理

氣化是一種非催化之不完全氧化反應[16]，亦即利用貧氧燃燒之技巧進行不完全燃燒反應。主要目的是將固體燃料轉換成一氧化碳及氫氣，做為燃氣或其他化學物品之原料。在氣化技術應用之燃料選擇上，可使用化石燃料，也可以使用廢輪胎或稻穀等廢棄物來處理，但經濟價值可能較低。所以含有較高熱值之化石燃料如煤炭等，仍是會被優先選擇[17]。煤炭燃燒(Coal Combustion)與煤炭氣化 (Coal Gasification) 不同點在於，煤炭燃燒是讓煤炭進行放熱反應提供熱能，故會產生大量之 CO₂ 及 H₂O。而煤炭氣化則是主要讓煤炭進行吸熱反應，使煤炭熱解並與氣化劑反應生成合成氣(可燃氣)，其中典型之合成氣有一氧化碳(CO)、氫氣(H₂)、甲烷(CH₄)等。然而現今大多數之製成產物多為 CO 及 H₂[18]。判斷氣化結果之理想與否，通常以

煤炭轉換率 (Coal Conversion Rate) 來表示。其定義為：反應後出口處氣相部分所含之碳重與反應前入口處固相部分所含之碳重的比值。煤炭轉換率愈高，表示氣化效果愈好。

煤炭之氣化過程十分複雜，其中包含兩個主要步驟，分別為煤炭之熱解與去揮發化(Pyrolysis and Devolatilization)以及煤焦氧化(Char Oxidation)。而去揮發化作用則是在氣化過程中，由於氣體與柏油類成份之易揮發性物質會隨著氣化溫度逐漸升高而從煤炭裡熱解釋放，此易揮發性物質之釋放為去揮發化作用 (Devolatilization)。圖 1-3 為煤粒受熱分解之示意圖[19]。揮發性物質經由氣體之氧化作用生成不同產物，有 CO_2 、 H_2O 、及 CO 等。而在去揮發化作用後生成之固態物焦炭(Char)，會與 CO_2 、 H_2O 及 H_2 進行氧化反應，最後所有氣體經過淨化處理之後，即可取得所需之合成氣。

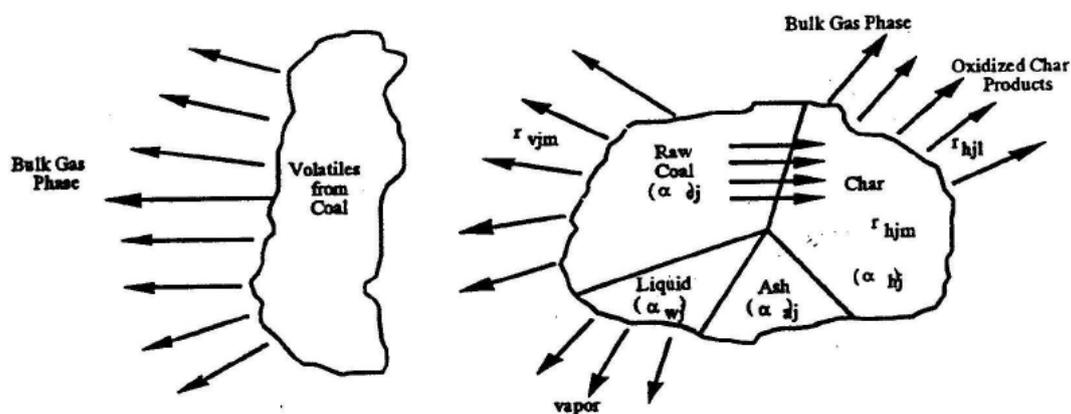


圖 1-3.單煤粒受熱分解示意圖[19]

在 1780 年就曾出現以熾熱之煤炭通以水蒸氣得到水煤氣。1839 年則發展出應用空氣與泥炭不完全燃燒製得氣化氣。19 世紀中期，西門子製作了第一台常壓操作之固定床煤炭氣化爐。第一次世界大戰後，更出現以煤炭氣化技術生產甲醇、合成氨等合成化學工業。為了滿足對氣化氣產量之需求，1920 年便出現了流體化床煤炭氣化爐。隨著科技之發展，加壓技術及工業生產富氧技術之成功，30 年代出現了加壓氣化技術，50 年代便發展出噴流床粉煤氣化技術。一般之氣化反應器可分為三種類型，分別為固定床(移動床)式 (Fixed-Bed)、流體化床式 (Fluidized-Bed) 及噴流床式 (Entrained-Bed) 氣化爐等 [20]，如圖 1-4 所示。

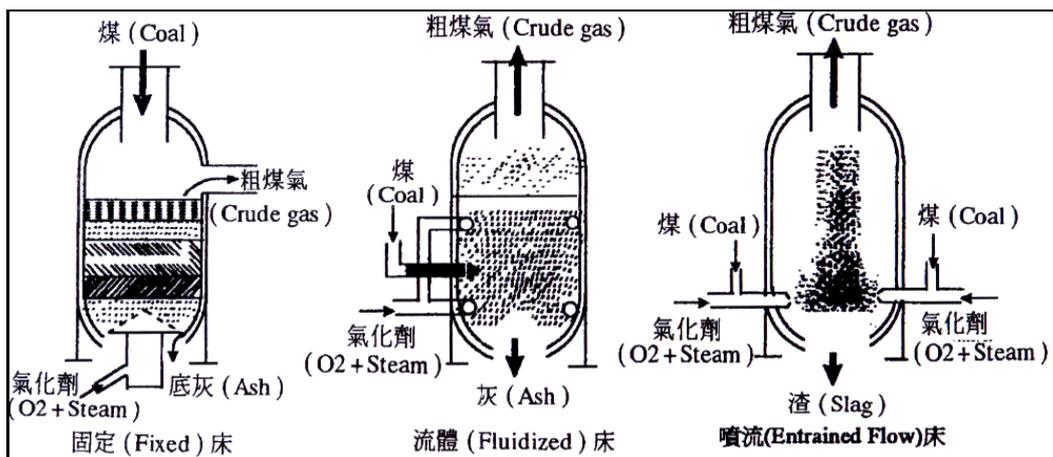


圖 1-4.三種典型氣化爐示意圖[20]

固定床式氣化爐為最常見且最古老之氣化程序。其特點為構造簡

單、可靠，具有高度之熱效益、煤料尺寸大，反應時間長(以小時計)，以及可在高壓操作與最少粉煤燃料預處理之要求，但單位容積處理量較小。固定床式氣化爐由下而上可概略分為四個反應區，分別為：燃燒區、氣化區、去揮發化區及乾燥區。如圖 1-4 所示，燃料由固定床式氣化爐上方進料孔進入，而由下方供應氧化劑。當流速低時，氧化劑只能從靜止煤粒間空隙穿過，均勻流通，此時相對於運動速度較大的氧化劑，煤粒床是靜止的，所以稱為固定床式氣化爐。燃燒區所產生之熱氣會與較冷之固態煤粒作熱能之交換。氣化區則為炭、蒸氣、 CO_2 、 H_2 作用之區域，吸熱作用產生了 CO 與 H_2 ，而 H_2 與 C 作用之微放熱反應產生了 CH_4 。 CO 或 H_2 可燃氣體會與氧反應燃燒，而放熱燃燒反應提供後續之氣化吸熱反應與煤灰乾燥所需之能量。由於氣化區已將所有氧氣消耗完畢，因此在氣化區上方的燃料只能受熱而產生熱解現象，而熱解通常伴有去揮發化作用，所以氣化區上方稱為去揮發化區。由於熱解需要相當多之熱能，所以乾燥區只剩少許的熱量能將燃料中的水份烘乾。

流體化床式氣化爐使用尺寸較小的煤粒及較快之氧化劑流速，氣體易於在煤粒空隙處流通，並使煤粒在一定區間內浮動，讓煤料像流體一樣有自由流動之特質。其特點為煤粒與氧化劑接觸面積大，反應

速度快（以分計算），單位時間處理之燃料較多。

噴流床式氣化爐之最大特點則為，氧化劑流速可再進一步提高，使用更小粒徑之燃料。而且，進料與進氣口皆位於相同位置，使用主進料口（Primary）及次進料口（Secondary）進氣道同時噴出混合之設計，讓燃料及氧化劑能在進入反應器時達到最佳之預混狀態。其反應速率為三種氣化技術中最佳者（以秒計），單位時間處理之燃料也最大。目前國外著名之 Shell、Texaco、及 Mitsubishi 等氣化程序，皆採用噴流床式氣化爐。因此，噴流床式氣化爐氣化程序將是未來大型氣化爐之主流。

貳、文獻回顧

在煤炭氣化之理論模式研究方面，首先關於煤炭熱解的部分，Anthony 與 Howard [21]曾針對煤炭熱解及碳氫氣化的理論模式作了詳細之探討。在高加熱率環境下，煤粒將產生比近似分析(Proximate Analysis) 所得之比率還要高的揮發物，同時該文也對等溫及非等溫、一階或高階的熱解率模式作一完整之介紹，並提供了熱解時化學動力模式之主要架構。Agarwal [22]則針對單一煤粒之熱解模式，指出煤粒熱解主要受到化學動力及熱傳因素之影響。對於較大之煤粒而言 ($d_p > 1\text{mm}$)，熱傳成為主要之控制因素，煤粒內部任意點之熱解量僅為此點溫度之函數。Ni 等人[23]曾針對噴流床式氣化爐提供了經簡化後之動能參數來描述 16 種不同反應之變化，並考慮反應時之質量平衡。Biba 等人[24]提出靜止床(Stationary Bed)加壓下之煤炭氣化之數學模式，此數值模式之理論基礎包含了質量與能量守恆定律，藉由使用 TESLA 200 電腦計算程式，可以求出其濃度與溫度分佈。Ruprecht 等人[25]及 Vamvuka 等人[26]曾分別針對噴流床式氣化爐發展出一維穩態之數學模式，提供了經簡化後之反應動能模式，並對炭焦之組成結構方面，提供了許多訊息。

Smoot [27]對煤炭氣化理論做了更詳細的定義，考慮了更完整之

氣化物理及化學過程，其過程有：

反應物紊性混合 (Turbulent Mixing)

煤粒紊性散佈 (Turbulent Dispersion)

煤粒熱對流加熱 (Convective Coal Particle Heatup)

煤粒熱輻射加熱 (Radiative Coal Particle Heatup)

煤炭去揮發化作用 (Devolatilization)

生成揮發物之氣體反應 (Gaseous Reaction of Volatiles)

煤焦中之異相反應 (Heterogeneous Reaction of Char)

煤渣 (Ash/Slag) 之形成與殘留 (Residue)

Smoot [27]並針對不同之反應時間、壓力、煤種及氣化後之污染物，作了詳細之理論分析。煤炭之反應過程包含了同相反應 (Homogeneous Reaction) 及異相反應 (Heterogeneous Reaction)。而不同成分間之反應包含了煤炭與 O_2 、 CO_2 及 H_2O 間之反應，其中壓力、煤種、溫度、煤炭性質及氧化劑濃度之不同，皆會影響其反應速率之變化。在高溫之操作條件下，將可增加反應速率及減少氣體及固體之殘留時間，生成較多之合成氣及較少之甲烷氣生成量。在高壓之條件下，可增加煤炭之轉換率及能量釋放之效率。雖然高溫高壓之氣

化反應爐具有較好之反應效能，但在反應爐之設計上會有較高之困難度及較多之成本。

Wen 與 Chaung [28]及 Govin 與 Shah [29]分別針對 Texaco 噴流床氣化爐進行一維穩態模式分析，並與實驗數據比較。其中 Wen 與 Chaung [28]主要以固-氣兩相之質量守恆及能量平衡來討論，對於動量變化則未加以探討。Govin 與 Shah [29]則提供了經過簡化後之動能模式，使分析較趨於完善，但對於熱解之動態分析，仍不夠詳盡。其分析結果顯示，影響氣化之參數 O_2/C 須介於 0.8~0.9， H_2O/C 則須介於 0.3~0.6，方能得到較理想之氣化效果，同時亦可使煤炭轉換率達到 98%~99%。Sprouse [30]亦曾針對噴流床式氣化爐中粉煤在惰性氣體中之轉換過程，進行一維穩態模式分析。由煤粒內部之物種及能量方程式與氣體之守恆方程式，求得反應器中各位置之氣相組成及溫度。在化學反應方面，則以兩個化學方程式來探討甲烷形成之反應，而氣相之反應速率假設為無限快。Nicholas 等人[31]，針對實驗用之小尺度噴流床式氣化爐，在 1.07MPa 壓力下進行煤炭氣化實驗。煤炭-氧氣-水的進給質量比為 1.00：0.91：0.27，可得到 79±3%的煤炭轉換率。經由觀察，煤炭中之氫原子及氧原子轉換遠比碳原子迅速，去揮發化作用則發生於接近入口處。其快速反應是致使煤炭轉換率增加

之原因。最後在出口處產生之 CO 濃度達 44%，H₂ 濃度達 20%。其實驗結果與數值模擬結果比較，已可得到不錯之可靠性。Neogi 等人 [32] 針對實驗用之流體化床氣化爐作了實驗及理論分析。考慮化學反應及固-氣相之質傳熱傳在等溫系統中的氣化過程，以簡化過之化學反應機構表示，氣相部分考慮 CO₂, H₂O 與 CO, H₂O 之轉換反應。由於使用之煤粒粒徑很小，平均粒徑約為 2.97E-4 m，故假設熱解反應無限快。其分析結果顯示：當氣流溫度升高時，氣體生成物之生成率相對提高。因其反應時加入水蒸氣氣流，產生之含熱質氣體主要以 H₂ 為主。

Smoot 等人 [33, 34] 曾使用模擬程式 PCGC-2 (Pulverized Coal Gasification and Combustion in Two-Dimension) 來模擬對稱之噴流床式氣化爐。用四種不同產地之煤炭在接近大氣壓力下進行氣化模擬，預測不同之模式參數及測試變數對氣化所造成之影響，並與實驗結果比較。其中，模式參數包含了完全或部分平衡 (Full/Partial Equilibrium)、煤炭揮發物的化學定量系數 (Stoichiometric Coefficients)、不同成分的反應速率 (Heterogeneous Reaction Rates) 及熱損失因數 (Heat Loss Factor)，皆會對氣化氣含量及煤炭的轉換率造成不同的影響。測試變數包含：改變主要及次要水份的進給率，不同的

入口溫度，及氧氣與煤炭的比值。由模擬結果發現：(1)使用 Partial Equilibrium 將可得到較高之煤炭轉換率，但對生成燃氣濃度分佈影響不大；(2)揮發物質係數之設定，會影響煤炭轉換率及生成氣之組成，當揮發物多時，煤炭轉換率及 H₂ 濃度會增加，CO 濃度則變化不大；(3)不考慮熱損失因數時，將可得到較高之煤炭轉換率及較高濃度之合成燃氣，當熱損失因數為 0.5 時，生成燃氣之分佈則較接近實驗值；(4)沒有水蒸氣參與氣化過程時，煤炭之轉換率及 CO 的形成將最高；(5)增加水蒸氣進給率，將降低煤炭之轉換率及 CO 與 CO₂ 之比值；(6)較高之 O₂/C，得到較高的煤炭轉換率及較低之 H₂ 生成量。

Kim 等人[35]探討了利用流體化床型附加抽風管 (Draught Tube) 以取得高熱量 (High Calorific Value, High CV) 之生成氣。由於流體化床型式存在著本身因煤破壞而造成相當高之碳損失，以及因旁通管造成部份氣體沒有參與反應之缺失，所以加入抽風管分離兩個反應區 (抽風管區與環區) 解決此一問題。Chen 等人[36]以數值模擬分析粉煤在二階段進料上吹式噴流床煤炭氣化爐 (Up-Flow Two-Stage Air Blown Entrained Flow Gasifier) 之氣化現象，兩相流假設為三維穩態流，使用 MSPV (Multi Solids Progress Variables) 之方法來模擬氣化反應及反應物混合過程。此模式成功的預測揮發物燃燒和不同成份焦炭

反應所生成的生成物之組成含量。揮發物紊流之變動(Turbulent Fluctuation)及焦炭-氧的反應會對溫度及氣體的組成所造成之影響，同時此模式之發展不能忽略紊流/氧化反應間之相互影響。同年，Chen 等人[37]針對相同之氣化爐，採用相同之物理及化學模式，模擬分析在不同工作條件下，氣化爐之氣化現象，作出以下之結論：(1)煤炭去揮發化和煤焦氧化反應對於煤炭轉換率有較大之影響；(2)煤炭之轉換率與去揮發化之速率無關，與 Char-O₂、Char-CO₂、Char-Steam 之動能化學反應速率(Chemical Rate of Kinetics)有關，粉煤粒徑大小之影響則較小；(3)空氣與煤炭比例會影響轉換率及生成氣之熱質，當增加空氣時，煤炭轉換率提高，隨著也增加 CO₂，相對減少 CO 及 H₂ 之濃度。次年，Chen[38]等人利用數值模擬進一步針對氣化爐之外型進行設計及探討。其研究中發現，氣化爐中燃燒區與連接反應區之擴散區喉部面積愈小或燃燒區及反應區之入口渦旋比例較小，則煤灰較不會停留在擴散區之壁面。

在加壓情況下反應之研究方面，Liu 等人[39]針對壓力之大小、反應之動能變化及炭焦之結構對加壓式噴流床氣化爐所造成之影響進行研究，並與其他文獻進行比較分析。並發現其模擬之結果顯示，分別在常壓與高壓之計算結果與實驗值相當一致，但若直接將常壓之

反應動力參數外推(Extrapolate)至高壓情況時，將會高估 15%左右之碳轉換率，顯示高壓環境下之反應動力參數無法直接從常壓之數據直接外推來獲得。煤炭中若含有較多之揮發性物質，由於快速之熱釋放，將可得到較高之煤炭轉換率。Choi 等人[40]，以數值模擬水煤漿(Coal-Water Slurry)在 KIER 噴流床式氣化爐中的反應特性。以 Random Trajectory Model 描述固相反應，以 $k-\varepsilon$ 描述氣相反應，以 Eddy Break-Up (EBU) Model 描述相同成分及不同成分之間之紊流氣體反應速率。主要為控制 O_2/C 之比值，比較 O_2/C 比為 0.8、0.9 及 1.0 時之溫度、CO、 H_2O 及 H_2 之成份分佈，並與實驗比較，其趨勢相當一致，但在反應爐的熱損失方面，仍需加以改善。

Wall 等人[41]指出壓力對於氣化反應之影響，並指出過往文獻大多著重於實驗分析，較少以計算模擬進行探討；在高壓下將生成高孔隙率之煤焦顆粒(Char Particle)，煤焦結構對於其燃燒室出口殘留量以及煤渣(Ash)之生成量扮演著相當重要之角色。一般而言，在高壓下，煤之顆粒將以較快之速率燃燒，並形成較小之煤渣顆粒。提高反應物之壓力將能夠提昇煤焦之燃燒以及氣化反應速率，此現象可由吸附-脫附機制中獲得解釋。而大部份對於挾帶床氣化爐之研究大多在較低之溫度下進行($\sim 1000^\circ C$)，此是因為高溫操作之挾帶床氣化爐之困難

度與建造成本皆較高，不過高溫操作之挾帶床氣化爐已為現用商業主流。最後指出在高壓情況下，煤渣生成之機制尚未明確，此部份則需要往後更多之研究以了解其細部現象。

除上述簡化之數學模式及自行發展之計算程式外，亦有一部份研究是採用泛用型計算流體力學程式進行煤炭氣化氣及之模擬，例如 Skodras 等人[42]以商用軟體 FLUENT 4 模擬泡沫式熔融煤渣 (Foaming Molten Slag) 氣化反應器之效能，並採用自訂函數描述其氣化現象，同時求解氣化現象之流場及熱傳等方程式。其模擬與實驗比對之結果相當一致，顯示出其所提出之分析模式，對於熔融煤渣氣化反應器之操作中，乃是一相當實用之分析工具。Zhong 等人[43]採用三維 Eulerian 多相模式，封閉式(Closure Law)顆粒流(Granular Flow)之反應動能模式(Kinetic Theory)，以分析挾帶床之氣-固流場行為；並探討非理想顆粒之撞擊現象之限制對於氣化效能之影響；結果顯示此限制對於氣化之影響相當大，與實驗比較，此限制係數為 0.93 時，方能模擬出其分析之反應器之特性。模擬結果同時顯示，對於煤炭氣化過程中，當噴流氣體流率與流體化氣流量相同之情況下，將有最佳化之氣-固流場模式。此外，從徑向之顆粒分佈可知，氣體阻力以及顆粒撞擊是主導顆粒移動軌跡之主要因素。

Silaen 等人[44]以 FLUENT6.1 模擬兩段式(Tow-Stage)煤炭氣化爐，反應模式採用 Eddy-Dissipation 模式來描述爐內之反應行為，並發現水煤漿(Coal Slurry)進料模式比煤粉(Coal Powder)進料模式有更佳之產氫效能，但相對的煤粉進料模式卻比水煤漿進料模式有更佳之產 CO 效能。而吹氣式(Air-Blown)操作會獲得較差之煤炭轉換效率與較低之產氣熱值。壁面冷卻效果對產氣影響較不重要。最後指出兩級式設計具有能夠調整不同區域之進料比例之優點，因此具有達到預期所需要之產氣效能之潛力，但其氣化之結果並無與實驗結果做比對。

Wang 等人[45]以 FLUENT6.1 模擬兩段式水煤漿進料之煤炭氣化爐，反應模式採用 Eddy-Dissipation 模式來描述爐內之反應行為，在其進料模式測試中發現在頂部噴水時會產生較多之氫氣，但同時二氧化碳也會上升，因此建議在進料區域噴水，因為在進料區域的炭較多，且溫度較高，此環境下較適合進行氣化反應產生氫氣，故較不會產生二氧化碳。另外並發現採用一支燃料注射器會比採用三支燃料注射器的氣化效能來得好。但其計算結果與實驗比對其產氣成份與出口溫度時發現其模擬結果與實驗值差距甚大。

Sialen 等人[46]針對兩級式煤炭氣化爐，嘗試以不同燃料注入角度

之測試中發現，當燃料注射器皆擺在同一水平面時會有最佳之產氣效能，而整體而言，燃料轉換效能受反應器內流場形態影響之變化幅度約 17%。

早期之軟體只能以較簡略之方式模擬氣化之程序，發展至約 2007 年為止，軟體在氣化方面之模擬才較成熟，例如 Syred 等人[47]指出商用軟體 FLUENT 6.0 已被證實能夠以 Lagrangian 軌跡法分析複雜流場中之燃燒顆粒行為。其對於入口處之固態燃料之燃燒能夠藉由適當調整以獲得初始之流場之空氣動力行為，但若顆粒會流經整個反應器時，此軟體則無法處理。尤其是氣旋式燃燒器(Cyclone Combustors)以及藉由離心力增強之顆粒氣化反應器等情況，此軟體只能藉由改變顆粒之尺寸分佈之方式，即採用破碎(Fragmentation)方式來處理顆粒之氣化或燃燒行為。此篇研究探討將破碎模式納入 FLUENT 分析模式中步驟，並應用至各種不同之反應系統。其結果顯示，採用其納入之破碎模式能夠在許多計算上有困難之處得到改進，但對於真實破碎條件仍需要建立較佳之反射行為以分析不同形態之實驗系統。最後並指出，其提出之單步破碎模式(Single Step Fragmentation)需要更進一步之擴展，尤其在具有許多微小顆粒之反應器中更需要多步之破碎模式，方能準確的模擬其特性。

Perkins 等人[48]針對煤礦直接氣化(Underground Coal Gasification Cavity)以商用軟體 FLUENT 6.1 建立二維軸對稱之 CFD 分析模式，以模擬氣化過程中之熱傳、質傳與化學反應等現象。其模擬結果顯示，當採用底部噴入氧化劑時，煤渣上方流場之流動主要受浮力所主導，這是因為燃燒所產生之溫度梯度所致。當氧化劑從氣穴上方注入時，大部份產生之氣化氣將會進行氧化，並提高溫度而降低熱值。模擬之結果與實際地下氣穴氣化所觀察之結果相符合。Grabner 等人[49]以商用軟體 FLUENT 6.2 針對加壓式流體化床氣化概念建立分析模式。其氣化模式乃是採用 Steam/Oxygen 以及褐煤(Lignite)為燃料，氣化量預定為 4800 噸/天(1000MW)，且操作在 33bar 之情況下。以其提出之數值模式探討流場形態，紊流行為，產氣組成，溫度以及熱幅射等現象。並與文獻中類似之流體化床系統相比較得到相符之結果。並指出，為了預測固體之行為、因熱解使得顆粒濃度、顆粒大小改變及表面反應等現象，顆粒的軌跡乃是採用 Eulerian-Lagrangian 模式來描述。當改變總顆粒之質流率時，會發現以反應器高度為函數之壓力降存在。

Wang 等人[50]針對兩段式煤炭氣化爐，嘗試以不同開口大小之煤

渣接頭(Slag Tap)分析產氣與排渣之情況，並發現開口較大之設計可以使煤渣流動順利，但缺點為熱損增加、並且會降低氣化效能，以及降低產生之混合氣之熱值，且未反應之揮發物將會增加。Wang 等人[51]針對挾帶床式氣化爐，在採用不同燃料噴注器情況下，探討其熱傳現象及損壞之情況，並發現錐型燃料噴注器比較容易燒壞。但一但操作時間夠久，兩種燃料噴注器都會損壞，此是因為原先設計用以保護燃料噴注器之防火磚在高溫環境下終將失效，故使燃料噴注器直接暴露在沒有任何保護之反應室中之故。Wang 等人[52]針對挾帶床式氣化爐搭配頂部噴水之機制探討不同水滴噴注情況之冷卻效果，並發現採用小顆粒之水滴時將使冷卻區段縮短，而採用較大顆粒之水滴的話，水滴將會跟氣流撞擊，撞擊後會散往上/下游區域，並讓冷卻流能有效滲透至上游區。而往上 45 區噴注冷卻水或以 10 冷之偏斜角度噴注冷卻水會降低氣流衝擊之程度，並縮短有效冷卻區段長度，進而降低下游氣流之溫度。而以 10 斜偏斜角度噴注冷卻水時能夠有效的在最短的距離內達到冷卻的目的。Wang 等人[53]針對挾帶床氣化爐搭配不同紊流模式與去揮發化模型探討不同模式之計算結果，並發現紊流模式對結果之影響很顯著。在測試的 5 種紊流模式當中，標準的 $k-\epsilon$ 流跟 RSM(Reynolds Stress Models)模式會有一致的結果。而在測試的 4 種去揮發化模式中，單步(Single Step)與化學滲出(Chemical

Percolation)模式會得到適中且一致之去揮發化速率。而改變粒徑大小時之測試中發現，當粒徑變大導致粒子之慣性增加時，噴注之煤粒會與氣流撞擊產生強大之迴流區，該迴流區能夠延長煤粒在氣化爐內之停駐時間。

至 2009 年，商用軟體在模擬氣化爐之現象已具備相當之能力，例如 Ajilkumar 等人[54]指出若能瞭解煤炭氣化中之熱/質傳現象，將對於評估氣化爐之效能與設計/操作參數等最佳化程序有相當大之助益。該研究並採用商用軟體 FLUENT 6.2 針對空氣注入式(Air Blown)之實驗室級之氣化反應器建立數值分析模式。在此模式中，連續相(Continuous Phase)之守恆方程式乃是在 Eulerian 架構(Frame)下求解，而顆粒相(Particle Phase)則是在 Lagrangian 架構(Frame)下求解，並以互動式源項(Interactive Source Terms)將兩個不同之相建立耦合關係。顆粒因為紊流之分佈現象(Dispersion)是採用隨機軌跡模式(Stochastic Tracking Model)來描述，並搭配氣相之 $k-\varepsilon$ 模式來計算。煤炭之氣化程序將包括去揮發化、揮發物之燃燒、煤焦之燃燒及氣化等現象。其結果發現，氣化爐內之整體溫度乃將隨著 Air/Steam 比例之增加而增加，並導致氣化爐內不同反應步驟之加速。同時，氣化效能之相關指數包括碳轉換率，出口氣體熱值及冷煤氣效率(Cold Gas

Efficiency)可藉由其數值模式進行評估。其預測之結果與文獻中之實驗結果相當一致。

Wang 等人[55]採用四種不同化學反應模式：(1) 包括異相固體反應與同相氣體反應之有限速率模式(Finite Rate Model)；(2) 即時氣化模式(Instantaneous Gasification Model)-慢速水氣轉化反應(Slow Water Shift Rate)；(3) 即時氣化模式(Instantaneous Gasification Model)-快速水氣轉化反應(Fast Water Shift Rate)-採用 Eddy-Dissipation 模式；(4) 總體化學平衡模式(Chemical Global Equilibrium Model)，進行挾帶床式氣化爐效能分析。並發現採用即時模式時，反應會很快完成，而採用有限速率模式時反應則較慢。另外發現水氣轉化反應對預測產氣組成之準確性影響很大，採用快速水氣轉化反應模式之結果與總體化學平衡模式很接近，而在採用慢速水氣轉化反應模式下，即時氣化反應模式與有限速率模式會達到類似之出口氣體組成跟溫度，但反應器內部氣體/溫度分佈差異甚大。對典型的挾帶床氣化爐而言，在有觸媒情況下，可以使用快速水氣轉化反應模式，而慢速水氣轉化反應應在無觸媒下使用。另外，由於放熱之正向水氣轉化反應傾向於在低溫環境下進行，因此在模擬挾帶床之煤粒氣化時，應採用慢速水氣轉化反應模式。在有限速率模式下，改變煤粒尺寸可發現，較小之煤粒之產

氣組成與熱值跟使用即時氣化模式較接近。另外對水煤漿(Coal Slurry)進料採用兩種模式來模擬：結合煤粒與水滴形成化合粒子、與分開煤粒與水滴兩種模式。理論上後者會較接近真實情況，但模擬結果仍有差異，主要是因為 CFD 模式之不確定性之關係。整體而言，即時氣化模式能夠提供整體氣化爐效能之評估，包括溫度、熱值與氣化效率，但都不足以捕捉大部份氣化爐區域中之氣化現象，而有限速率模式方能預估之局部氣化現象。

在國內相關研究方面，洪[56]以 CHEMKIN 程式模擬分析 Texaco Entrained-Flow 氣化爐。其模式包含固-氣兩相之守恆方程式，討論二相間之熱質傳過程，並以簡化之化學動力機構討論氣化趨勢及各變數對氣化結果的影響。結論也驗證了 O_2/C (0.8~0.9) 及 $Steam/C$ (0.2~0.7) 為影響氣化之重要參數，且發現使用純氧當氧化劑比使用空氣效果更佳。其建議有：由於未考慮煤炭中含量較少的元素如 S, N, Cl 等，因此無法評估污染物產生的情形。除了操作環境及參數考量外，生成氣的熱值分析也是必要的。為了提高模擬之可信度，減少計算誤差，高壓氣體資訊的建立是必需的。周[57]使用含觸媒之焦炭以探討流體化床之氣化現象。實驗是在一直徑 90 毫米的床體內進行，於不同操作條件下，包括流體化速度，床內溫度，空氣/焦炭比，水蒸氣/焦炭比

以及含浸觸媒種類，探討對於生成氣體組成，氣體熱值以及碳轉化率之影響。由實驗結果發現，氫氣與一氧化碳會隨著床內溫度上升而增加；氣化含觸媒焦炭時，碳轉化率與氣體熱值在增加流體化速度與床內溫度時會比不含觸媒焦炭時為高；當增加空氣/焦炭比，碳轉化率會隨之上升，但氣體熱值會減少；當增加水蒸氣/焦炭比時，氫氣與氣體熱值會上升，但碳轉化率會減少。在其實驗中，就焦炭催化氣化反應來說，使用 10% K_2SO_4 + 1% $Ni(NO_3)_2$ 會有最好之催化效果。吳[58]以簡化成份後之氣化燃氣 (CO 與 H_2)，取代天然氣之燃燒，發現了 CO 含量愈多的氣體，可得到較高的燃燒溫度，但也得到較多的 NO 含量，反之亦然。此結果意味著，天然氣雖有較高的反應熱，但 NO 的生成量亦是不少，而愈少的 CO 含量之氣化燃氣雖然僅能提供較少的燃燒能量，但是卻不會產生較多的 NO 含量，對於能源的利用及環境的保護，有正面的幫助。

國內亦有採用軟體進行氣化爐之模擬，例如楊[59]以 PCGC-3 程式模擬噴流床氣化爐，發現影響煤炭轉換率之重要參數，除 $O_2/Coal$ 與 $H_2O/Coal$ 等參數外，當操作壓力越高時則煤炭轉換率將隨之提高。而當粉煤粒徑越小，其轉換率也相對提高，故操作壓力、粉煤粒徑皆是影響氣化效率之重要參數，該研究並驗證 PCGC-3 程式之可靠

性。郭[60]同樣採用 PCGC-3 程式，以三維模式模擬粉煤於上吹式噴流床氣化爐中之燃燒及氣化特性，模擬上吹式噴流床煤炭氣化爐，並與實驗比對以驗證程式之可靠性。接著針對 O_2/C 、 H_2O/C 、粉煤粒徑大小以及氣化爐進給角度進行參數分析。由其結果發現，當改變粉煤負載率使 O_2/C 比例降低時，則會使 CO_2 、 H_2O 生成量減少， CO 、 H_2 及 CH_4 生成量增加。當改變 O_2 量使 O_2/C 比例降低時，則會使 CO_2 、 CO 及 H_2O 生成量減少， H_2 及 CH_4 生成量增加，同時氣化爐內積碳量也會增加。當 H_2O/C 比例增加時，氣相反應區重組反應趨勢會提高，並產生較多之 H_2 ，使得在出口處 CH_4 生成量減少， H_2 生成量增加。另外增加 H_2O/C 比例、渦旋直徑及縮小粉煤粒徑，皆有助於降低粉煤氣化所需之時間。

煤炭氣化技術之應用，可有效降低燃燒煤炭產生之污染對環境造成衝擊，並可應用於高效率 IGCC 系統中，以達到 43% 以上之發電效率。雖然國外發展氣化複循環系統已經行之有年，規模已達商業運轉，如美國印第安那州 Wabash River 發電廠之示範等級，但目前國內煤炭氣化技術之應用屬萌芽發展階段，必須建立氣化爐建造之評估能力。而在其相當複雜之氣化過程當中，其化學動力反應機制是粉煤燃燒氣化過程之關鍵，必須要能掌握在氣化爐進料的化學動力反應的

細節，才能進一步掌握以計算流體力學模擬氣化爐內燃燒與氣化等模擬結果之品質。

本研究團隊先前採用泛用型商用計算流體力學軟體 FLUENT，耦合化學動力反應機制 CHEMKIN-Flamelet 之模型，針對挾帶床粉煤氣化爐建立含有化學動力反應機制之三維燃燒氣化數值模式。模擬結果顯示，由數值計算所獲得之氣化爐出口氣體成份比重之趨勢與氣化爐實際運行之結果一致。接著使用此分析模式進行不同燃料之氣化效能分析與各種操作參數對於氣化結果之影響等相關探討研究工作。而在 FLUENT-CHEMKIN-Flamelet 模式方面，本研究團隊已成功地建立其分析模式。但與實驗數據比較之結果中發現，結合 FLUENT-CHEMKIN-Flamelet 模式所獲得之結果與實驗值之出口成份相對誤差仍有 3.15%。此差異可能為非預混燃燒模式無法精確詳細的模擬化學反應機制的成分計算，為進一步探討紊流混合效應對燃燒速率之化學反應機制，將嘗試使用成分傳輸與有限速率化學性質模型，針對化學反應機制之計算做進一步的研究。

因此，本研究之目標乃是建立一整合 FLUENT 計算流體力學軟體及 CHEMKIN 化學反應運算軟體之完整數值計算模式。同時將參考

包含多步驟反應機制之研究文獻，並針對 FLUENT 耦合 CHEMKIN 之模型建立一則範例以驗證 FLUENT 耦合 CHEMKIN 模式之可靠度。並以挾帶床氣化爐分析為研究目標，建立一包含化學動力反應機制之完整多相紊流燃燒數值分析模式。此分析模式之燃料將以離散相 (Discrete Phase) 方式注入，並考量異相間之質量、動量及熱量傳遞關係。本年度將建立 FLUENT 內部計算化學反應機制之系統 ISAT(In-Situ Adaptive Tabulation) 與 CHEMKIN 運算軟體之模擬比較，以及相關參數測試包含氣化爐分段進料及進料加水等參數對氣化性能之影響，進行詳細之分析研究。

參、研究方法與過程

本研究以泛用型商用軟體 FLUENT，針對挾帶床式氣化爐建立分析模式。氣化爐內主要可分為連續相之氣相流場與分離相之噴霧流場兩類，相關模式說明如下：

一、連續相-守恆方程式

首先在連續相(Continuous Phase)方面，將包含質量、動量、能量以及成份守恆方程式：

質量守恆：

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i) = \bar{S}_p \quad (1)$$

其中等式右方之質量源項表示由於粒子熱解所產生之氣相質量。

動量守恆：

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \overline{u_i u_j}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \mu \left[\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right] - \frac{\partial (\overline{\rho u'_i u'_j})}{\partial x_j} + \bar{S}_{M_k} \quad (2)$$

採用 Boussinesq eddy viscosity hypothesis，式(2)中之 Reynolds stresses 可表示成：

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = -\frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} + \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3)$$

而紊流動能黏滯性可以下式評估：

$$\nu_t = C_\mu k^2 / \varepsilon = \frac{\mu_t}{\rho} \quad (4)$$

另外紊流動能 k 與其消散率 ε 之傳輸方程式為：

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i k) = P + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) - \rho \varepsilon \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{u}_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{1\varepsilon} P - C_{2\varepsilon} \varepsilon) \quad (6)$$

式(5)與(6)中之 P 項為：

$$P = \frac{1}{2} \nu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)^2 \quad (7)$$

而紊流模式中所使用之相關經驗常數如下[61]：

$$\begin{aligned}
C_\mu &= 0.09 \\
C_{1\varepsilon} &= 1.44 \\
C_{2\varepsilon} &= 1.92 \\
\sigma_k &= 1.0 \\
\sigma_\varepsilon &= 1.3
\end{aligned} \tag{8}$$

能量守恆方程式：

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i h) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + S_{ph} \tag{9}$$

其中等式左方表示對流效應之熱傳， h 為熱對流係數；而等式右方之第一項表示熱傳導， K 為熱傳導係數，第二項為能量源項，乃是評估連續相與粒子之間之輻射熱傳量以及氣相之化學反應之能量。

成份守恆方程式：

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{km} \frac{\partial Y_k}{\partial x} + \frac{\mu_t}{S_{Ct}} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) + S_{pY_k} + R_k \tag{10}$$

其中等式右方之第一項表示成份之擴散現象，而 D_{km} 為擴散係數，第二項為質量源項，乃是由於粒子之熱解與氧化反應所產生之相關成份，而第三項為化學反應所產生/消耗掉之成份，其在 EDC (Eddy Dissipation Constant) 模式中方程式為：

$$R_i = \frac{\rho(\xi^*)^2}{\tau^*[1-(\xi^*)^3]}(Y_i^* - Y_i) \quad (11)$$

其中 ξ^* 與 τ^* 分別代表化學反應之小區域範圍(fine-scale)及時間長度(time-scale)，而此兩參數與紊流流場之關係為：

$$\xi^* = C_\xi \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2}\right)^{\frac{1}{4}} \quad (12)$$

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (13)$$

其中 C_ξ 為體積分率常數=2.1337、 ν 為動能黏滯數及 C_τ 為時間長度常數=0.4082。

二、分離相-傳輸方程式

動量傳輸方程式

在離散相方面之傳輸方程式中，離散相中之粒子之軌跡乃是藉由將粒子上之各項作用力積分所求得，並以 Lagrangian 參架(Reference Frame)所描述。粒子上之作用力包括其自身之慣性以及氣流阻力等項，並以下式描述：

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(u - u_p) \quad (14)$$

其中

$$\begin{aligned} F_D &= \frac{18\mu C_D \text{Re}}{\rho_p d_p^2 24} \\ \text{Re} &= \frac{\rho d_p |u_p - u|}{\mu} \\ C_D &= a_1 + \frac{a_2}{\text{Re}} + \frac{a_3}{\text{Re}^2} \end{aligned} \quad (15)$$

而式(15)中之各項係數乃是用於圓球式顆粒並且在一定範圍內之 Re 所採用[62]。顆粒之軌跡乃是以瞬時速度來預估，而瞬時速度乃是跟平均速度(Mean Velocity)以及振盪速度(Fluctuation Velocity)有關：

$$u^* = \bar{u} + u' \quad (16)$$

而上式(16)中之振盪速度是以 Stochastic Discrete Random Walk 模式來定義，採用此模式來模擬顆粒與氣流渦旋(Eddy)之間之相互作用現象。

而噴入氣化爐中之粒子之初始分佈乃是以 Rossin-Rammler 分佈函數來描述，利用其資料庫來對應不同的粒子大小來作分布如圖 3-1 所示，而粒子直徑與粒子之質量分率之關係式如方程式(17)。

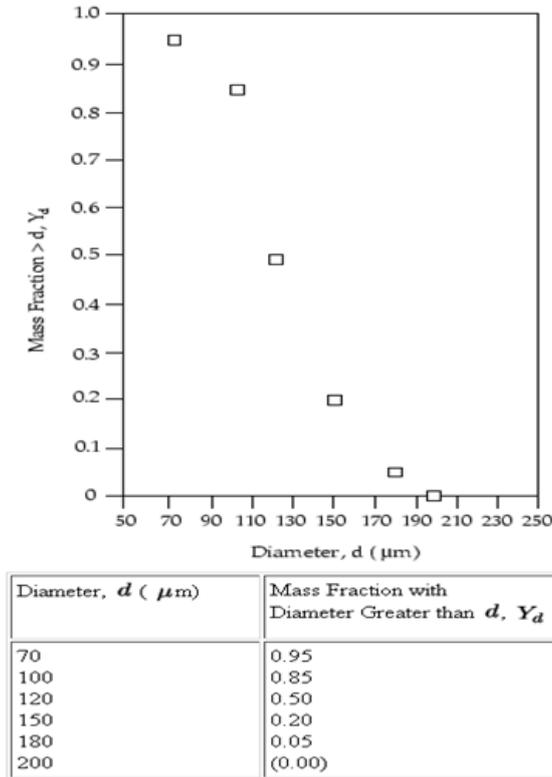


圖 3-1. 粒子直徑與粒子之質量分率之關係圖

$$Y_d = \exp(-d_p / \bar{d})^n \quad (17)$$

其中 \bar{d} 為平均粒子直徑，而 n 為分佈參數。而粒子之熱傳現象包括對流項、輻射項、去揮發過程以及表面反應等現象，可表示如下：

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \varepsilon_p A_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) + \frac{dm_p}{dt} h_{fg} - f_h \frac{dm_p}{dt} H_{\text{reac}} \quad (18)$$

其中 m_p 與 T_p 表示粒子之質量以及溫度，而 θ_R 為輻射溫度 ($\theta_R = (G/4\sigma)^{1/4}$)，而 G 為入射輻射量，與輻射強度有關：

$$G = \int_0^{4\pi} I d\Omega \quad (19)$$

氣化爐內之輻射熱傳乃是採用 P-1 模式來計算[63]。

而粒子與氣相流場之間之熱對流係數乃是以 Ranz 以及 Marshall 等人[64]所提出之修正式來評估：

$$N_u = \frac{hd_p}{k} = 2.0 + 0.6 \text{Re}_d^{1/2} \text{Pr}^{1/3} \quad (20)$$

在(18)式當中等號右邊之第三與第四項分別在去揮發化以及煤焦反應的過程中是重要的兩個項，而在初始之粒子加熱過程中較不重要。

在煤炭粒子之反應方面，煤炭粒子中之揮發物將進行去揮發化之程序，此現象乃藉由 Badzioch 等人提出之單步反應步驟(Single Rate Reaction Step)模式來描述：

$$k = A_1 e^{-(E/RT)} \quad (21)$$

而去揮發化之速率則是：

$$\frac{dm_{vol}}{dt} = m_{p,o} (\alpha_1 R_1 + \alpha_2 R_2) \exp\left(-\int_0^t (R_1 + R_2) dt\right) \quad (22)$$

其中 $m_{p,0}$ 為初始煤炭粒子之質量，而 α_1 與 α_2 為產出係數 (Yield Factors)。本研究目前乃是採用 Single Kinetic Rate Mode。此模式乃是假設粒子裂解之速率與粒子之殘餘質量之間乃是一階相關

$$-\frac{dm_p}{dt} = k[m_p - (1 - f_{v,0})(1 - f_{w,0})m_{p,0}] \quad (23)$$

其中 m_p 為粒子質量(kg)， $f_{v,0}$ 為揮發物初始質量分率， $f_{w,0}$ 為蒸發/沸騰物質之質量分率(溼式燃燒情況下)， $m_{p,0}$ 為初始粒子質量(kg)， k 為反應速率(s^{-1})。在設定時，須注意 $f_{v,0}$ 之值，須略超過近似分析之值。而反應速率則是採用 Arrhenius 表示式來描述。

預設之 Pre-Exponential Factor 與 Activation Energy 在 FLUENT 裡的預設值分別為：

$$A_1 = 492,000 \quad (24)$$

$$E = 7.4E + 07(J/kgmol) \quad (25)$$

三、煤粒之相關性質

下表 3-1 為噴入氣化爐之煤粒相關性質，所採用之煤種為大陸神華煤[65]，其低熱值為 29.2 MJ/kg。

表 3-1. 煤粒相關性質

Property	Value
Density	1300 kg/m ³
C _p	1000 J/kg-K
Thermal Conductivity	0.0454 W/m-K
Latent Heat	0
Vaporization Temperature	400 K
Volatile Component Fraction(%)	33.76
Binary Diffusivity	5E-4 m ² /s
Particle Emissivity	0.9
Particle Scattering Factor	0.6
Swelling Coefficient	2
Burnout Stoichiometric Ratio	2.67
Combustible Fraction (%)	60

另外大陸神華煤成份之元素分析(DAF, Dry Ash Free)與工業分析

結果如下表 3-2 所示：

表 3-2. 煤成份之元素分析與工業分析

元素分析	Wt% (DAF)
C	0.80142
H	0.0423
O	0.14148
N	0.0118
S	0.003
工業分析	Wt%
Volatile ^a	0.39595
Fixed Carbon	0.539807
Moisture	0.053006
Ash ^b	0.011237

^a: modeled by $C_{11}H_{24}O_5$

^b: modeled by N_2

而粒徑分佈相關參數則如下表 3-3 所示：

表 3-3. 煤粒之粒徑分佈

Particle size distribution	(μm)
Minimum	50
Maximum	70
Average	60

而不同煤種之氣化效能分析部分，採用兩種煤炭成份做為比較[70]，

如下表所示：

表 3-4. Montana Rosebud coal 成份之元素分析與工業分析[70]

元素分析	Wt% (DAF)
C	0.7057
H	0.0495
O	0.1751
N	0.0104
S	0.0212
工業分析	Wt%
Volatile ^a	0.3859
Fixed Carbon	0.4902
Moisture	0.0346

Ash	0.0893
Gross Heat Value(MJ/kg)	26.1

^a: modeled by $C_{11}H_{36}O_8$

表 3- 5. Pittsburgh coal 成份之元素分析與工業分析[70]

元素分析	Wt% (DAF)
C	0.7826
H	0.0552
O	0.0986
N	0.0129
S	0.0263
工業分析	Wt%
Volatile ^a	0.379
Fixed Carbon	0.5296
Moisture	0.0228
Ash	0.0686
Gross Heat Value(MJ/kg)	30.1

^a: modeled by $C_{15}H_{42}O_5$

四、操作參數分析

此部分之研究乃是進行相關之操作參數分析，所分析之參數包括

以下三種：

1. Base case 之修正

2. 不同進料方式：煤炭加水測試

3. 氣化爐分段進料

在不同之操作參數下，進行出口混合氣體組成與出口氣體溫度之探討分析。

五、EDC 及 ISAT 運算機制

(一)、消散概念模型 EDC (Eddy Dissipation Concept)概念為：

把細微化學反應機制應用於紊流流動中，且假設化學反應在一小的紊流區域或結構上(ξ^*)。即紊流及細微化學反應機制反應下，相互作用之結果。而在 Fluent 中，此微小結構尺度的燃燒被假定在常壓下進行，而在時間尺度上進行的反應，是受阿瑞尼斯(Arrhenius)速率控制，且使用 ISAT 數值算法求解得之。

(二)、EDC 模式中，平均成份 i 在守恆方程式中之源項為：

$$R_i = \frac{\rho(\xi^*)^2}{\tau^*[1-(\xi^*)^3]}(Y_i^* - Y_i) \quad (26)$$

其中

Y_i^* ：在時間尺度內，經過 EDC 模式運算、反應後，之小區域範圍之質量分率。

ξ^* 與 τ^* 分別代表化學反應之微小結構尺度(fine-scale)及時間尺度(time-scale)，而此兩參數與紊流流場之關係為：

$$\xi^* = C_\xi \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (27)$$

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (28)$$

其中

C_ξ ：為體積分率常數=2.1337[69]

C_τ ：為時間尺度常數=0.4082[69]

ν ：為動能黏滯數

五、FLUENT 結合 CHEMKIN 之運算模式

首先介紹建立 CHEMKIN 模型之步驟：從相關文獻的化學機制中擷取所需之反應式，並將其轉譯成程式可讀取之格式，再利用 FLUENT 12 版的煤炭計算器(Coal Calculator)來計算去揮發化物質，如圖 3-2 所示，最後再修正去揮發化種類的原子組成以及反應參數，並將結果與實驗值做比對，目前之去揮發化物質由 $C_{1.37}H_{2.9}O_{0.61}N_{0.0583}$ 忽略 N 成分並將 C、H、O 比例整數化，即修正為 $C_{11}H_{24}O_5$ 。而之所以將去揮發化物質整數化是因建立 FLUENT thermo database 之格式限制。

Proximate Analysis		Ultimate Analysis (DAF)	
Volatile	0.39	C	0.803762
Fixed Carbon	0.506	H	0.042427
Ash	0.054	O	0.141946
Moisture	0.05	N	0.011866

Mechanism	Options
<input type="radio"/> One-step Reaction <input checked="" type="radio"/> Two-Step Reaction <input type="checkbox"/> Include SO2	<input type="checkbox"/> Wet Combustion

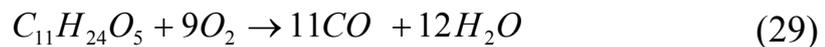
Settings	
Coal Particle Material Name	coal-particle
Coal As-Received HCV (j/kg)	3.04e+07
Volatile Molecular Weight (kg/kgmol)	30
CO/CO2 Split in Reaction 1 Products	1
High Temperature Volatile Yield	1
Fraction of N in Char (DAF)	0.7

Gas Phase Reaction	
$C_{1.37}H_{2.90}O_{0.61}N_{0.0583} + 1.10 O_2 \Rightarrow$ $1.37 CO + 1.45 H_2O + 0.0291 N_2$ $CO + 0.5 O_2 \Rightarrow CO_2$	

OK Apply Cancel Help

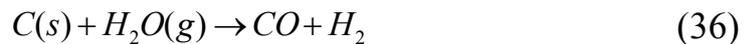
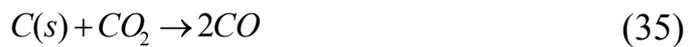
圖 3-2. 煤炭計算器之計算去揮發化物質示意圖

其中，反應式包含八條，五個同相反應及三個異相反應[26, 36, 54, 67]；當煤粒進行熱解之後，將釋放出可燃氣體，並形成固態煤焦(Char)。氣態之可燃氣體將進行氣相(同相)之氧化反應如下：





在式(29)中之碳氫化合物表示熱解產生之揮發物，其將進行富氧(Oxygen Rich)之平衡反應。而產生之一氧化碳與氫氣將進一步進行氧化反應，而一氧化碳與水蒸氣也將進行雙向之水氣轉化反應，如式(33)所示。而煤焦將與三種氣相成份進行氣化反應(異相)，其反應式如下：



本研究所採用之反應模型為 Species Transport, Eddy Dissipation Constant(EDC)模型，並搭配 CHEMKIN 反應機制進行氣化爐內之各式反應之計算，其中在 Options 的選項中，如果勾選“CHEMKIN-CFD from Reaction Design”即為使用 CHEMKIN 軟體來運算化學反應機制，否則即為使用 FLUENT 內部之計算系統 ISAT 來運算化學反應機制。而 FLUENT 之 EDC 模型結合 CHEMKIN 反應機制之介面，如圖 3-3 所示：

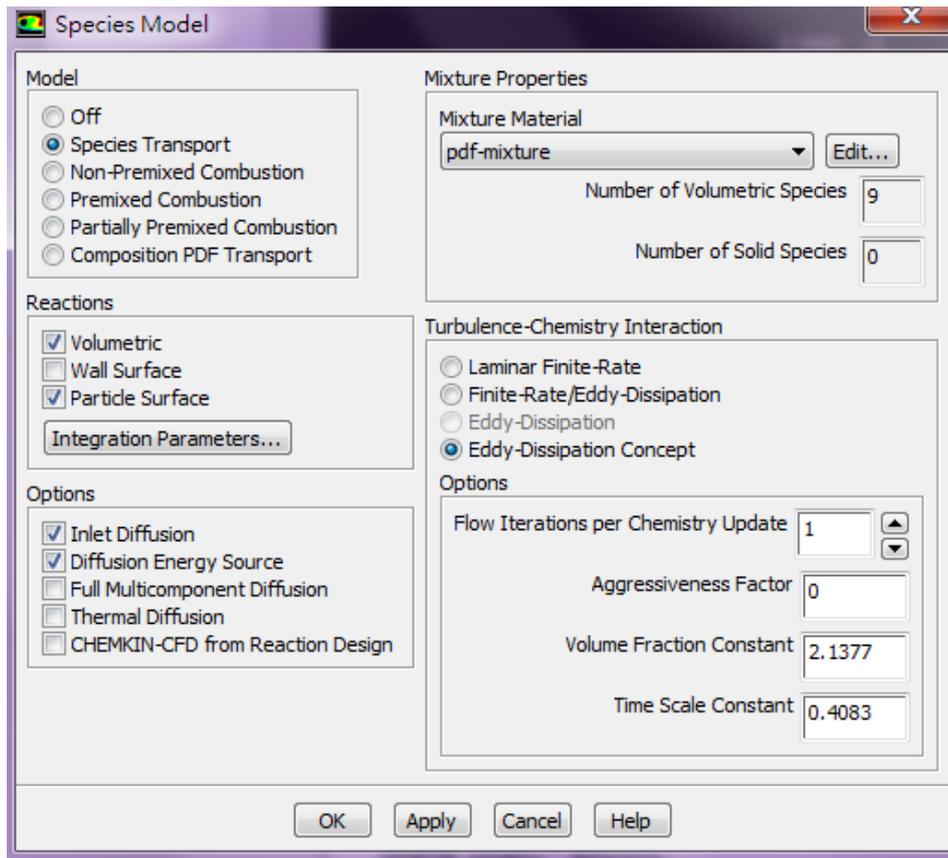


圖 3- 3. EDC 模型結合 CHEMKIN 反應機制之介面圖

八、EDC-ISAT 運算參數：

EDC-ISAT 之運算參數主要包括 Integration Method、ISAT 參數以及其它設定，分述如下。Integration Method 之設定介面如下圖 3-4 所示：

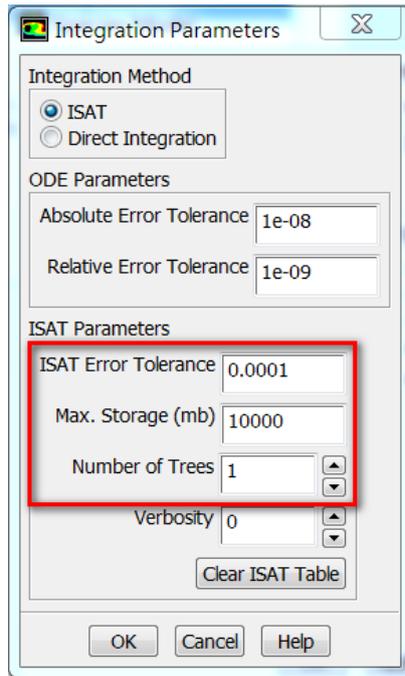


圖 3-4. EDC-ISAT 之 Integration Method 圖

(一)、Integration Method 部分：

1、直接積分法(Direct Integration)是以粒子構成向量的初始值為起點，通過對化學反應源項的積分獲得每個時間步長後的值。

2、ISAT 法則將粒子構成向量的可能取值製作成一個分支圖，在計算中儘量不用積分，而直接從圖中查詢相關向量值，因此可以省去積分佔用的計算時間，加速反應計算。

因 ISAT 適合模擬多維度流體、真實化學反應過程之計算。故在 Integration Method 部分，採取 ISAT 運算法則。此是因 EDC 計算資源量大且速度緩慢，故捨棄 DI 法(Direct Integration)，採用

FLUENT 手冊建議之 ISAT 模式下，理論上可比 DI(Direct Integration) 法快 100~1000 倍左右。

(二)、ISAT 參數部分：

1、 ISAT Error Tolerance：

該參數是控制 ISAT 在計算過程中，初始暫態錯誤的大小。原程式建議設定為 0.001，但為提高本研究精準度，故降低一個 order 到 0.0001。

2、 Max. Storage：

此為計算化學過程時，電腦所可容許的暫存記憶量。原先設定為 100MB，目前本研究調高至 300MB。經過測試，實際電腦運算需要之記憶體約為此設定值之 2~3 倍。

3、 Number of Trees、Verbosity：

Trees 為運算時，資料庫的階級分層，數字越大，資料庫能容納越多，但計算資源消耗大。Verbosity 則為監控 ISAT 在不同層級的細節。

(三)、其他數值求解參數：

而在 EDC 模型中，尚有其它幾項數值求解參數，如下圖 3-5 所示：

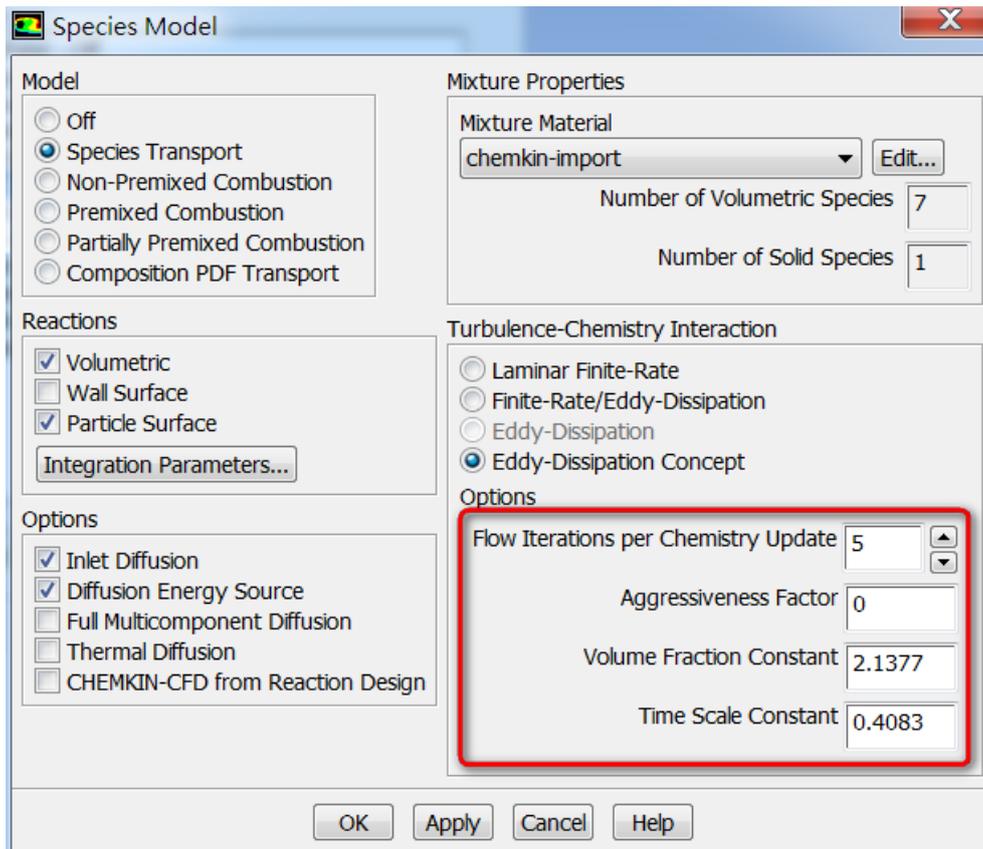


圖 3- 5. EDC 之 Species Model 介面圖

1、 Flow Iterations Per Chemistry Update：

指 EDC 在計算化學性質時，流場每隔幾次做一次更新，而增加此數目，可以減少計算資源，降低化學計算的複雜程度，但更新的頻率因而降低，FLUENT 預設為 1，但經過測試評估後，調整為 5 次。

2、 Aggressiveness Factor：

為 EDC 中，控制收斂數度及強度之數值因子。值的範圍介於 0 到 1 之間，0 表示穩定且收斂性佳，但計算收斂時間長。1 則是剛

好相反，為運算快但不穩定。程式預設值為 0，而本研究經測試後採用預設值。

六、氣化爐-幾何尺寸與入口條件

本研究所參考之實驗文獻，其反應器之幾何形狀如圖 3-6[60]所示。此氣化爐為上吹式噴流床粉煤氣化爐，燃燒室全長約 2.72m，燃燒室直徑約 15cm，內部燃燒室由防火磚堆砌而成，外部由鋼鐵包覆。進料模式採徑向進給，共三個進料口，分別位於氣化爐 60°、180°及 300°處。每一進料口之燃料於中心噴出，外圍環狀進料口則為氧化劑進料口，所進給之燃料，將於氣化爐中心處，即 X-Y 平面形成一渦旋，流場隨著渦旋往上方 Z 之正方向流動。每一進料口之燃料與氧化劑質量流率分別為 0.07731 kg/Sec 及 0.010231kg/Sec，其燃料組成為 N₂、水蒸氣與煤粒，進給溫度為 400K，出口壓力為 1470997.5Pa[60]。其中，相關物理模式包括流場之紊流模式以及熱輻射模式。而二級進料系統之氣化爐，則是原先在 Z 軸為 50 公分處之進料系統，再新增一組至 Z 軸為 100 公分為第二級進料系統。其將燃料之入口流率設定第一級與第二級為 3：1，氧化劑之入口流率設定則是第一級將氧化劑全部注入，第二級則無氧化劑注入。

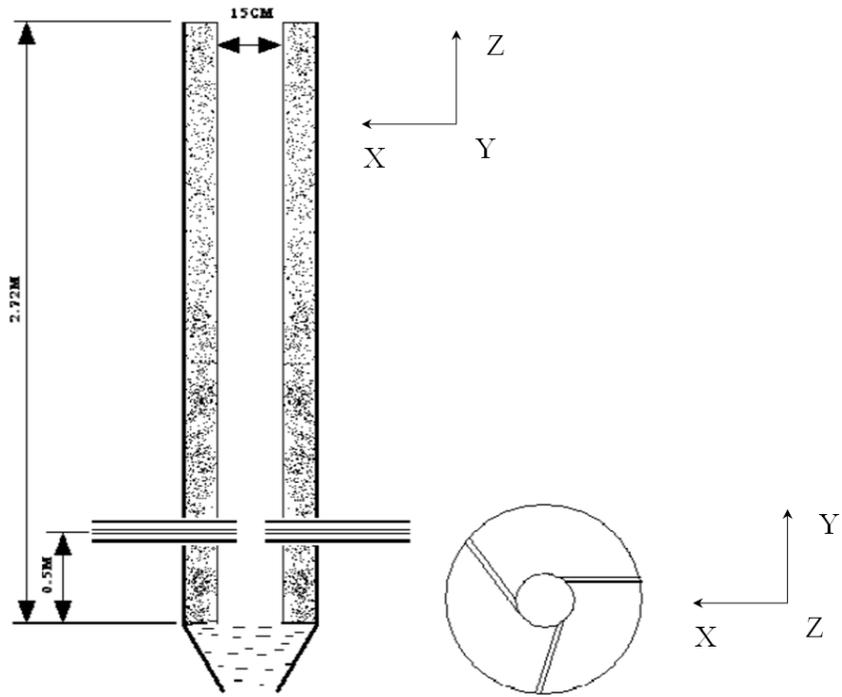


圖 3-6. 氣化爐外觀示意圖與相關尺寸 [60]

肆、主要發現與結果討論

在結果方面，主要乃是修正之前建立之 Steady-Flamelet 模型(以下稱之為修正前模型)之加水測試、修正後模型之出口成份結果與比較、氣化爐分段進料之氣化效能評估、以及 EDC+CHEMKIN 之基礎模型等。其相關結果分述如下。

一、修正 Steady-Flamelet 模型之加水測試

首先在原先 Base Case 之燃料中，將其含水之總質流量比例分別從 5.3% 降為 2.7%，以及提高至 7.7% 與 14% 來測試，且固定燃料中其他成分(N_2 、Volatile、Char)之質流量，而燃料之總質流量將隨加水比例增加而提升，其修正後之結果如圖 4-1 所示。

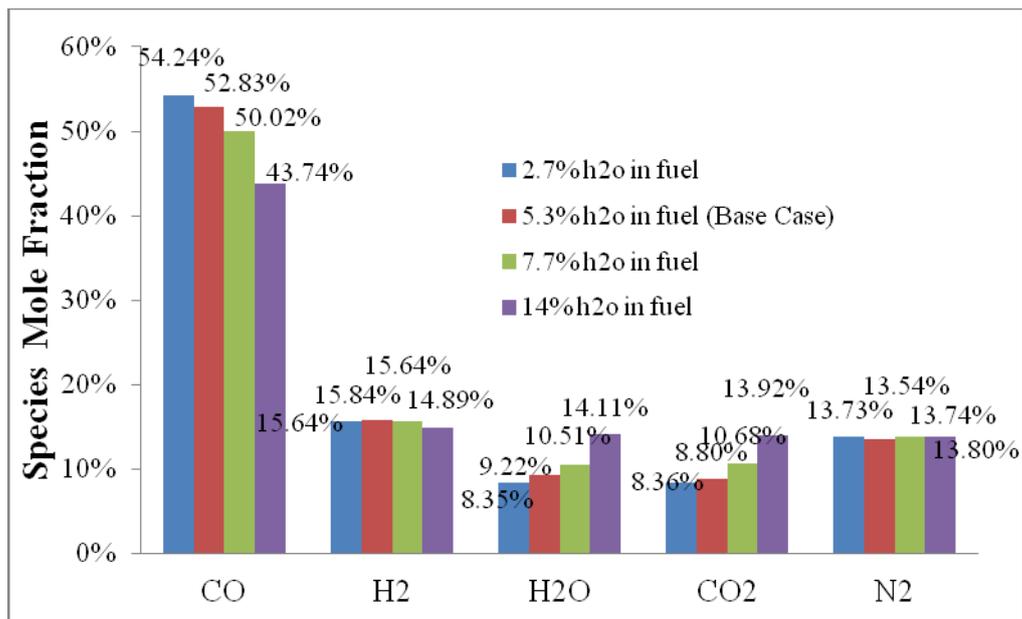


圖 4-1. 不同煤炭含水比例之出口成份比較圖

由圖 4-1 觀察可發現隨著加水比例上升， H_2 與 H_2O 的出口成分比例也隨之上升(含水量 2.7%至 5.3%)，其原因為加水後部分 H_2O 與一氧化碳進行水氣轉換反應生成氫氣和二氧化碳，而另一部分未反應則使出口水氣比例增加，故隨著煤炭含水量提高(含水量 2.7%至 5.3%)，氫氣、水氣與二氧化碳之比例亦隨之增加，一氧化碳則是隨之下降。而進一步提高含水量後發現氫氣比例會下降，但由氫氣之質流率進行比較可發現，氫氣產生量會隨含水量之提高而逐步增加，在煤炭含水量占 7.7%時出口氫氣質流量由 Base Case(5.3%)之 0.688 g/s 上升至 0.718 g/s，而在煤炭含水量占 14%時，出口氫氣質流量又降至 0.713g/s，故推測煤炭含水之比例與產氫有一最佳值，而本研究發現採用 7.7%可獲得較佳之產氫效能。在出口溫度方面，如圖 4-2 所示，觀察可得出口溫度會隨加水比例提高而下降。

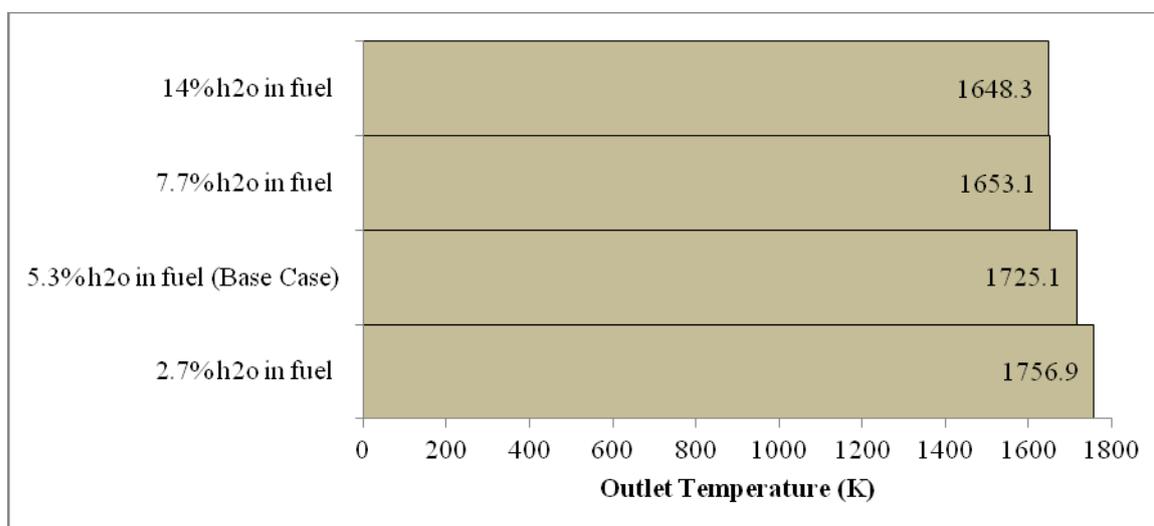


圖 4-2. 不同添加水比例之出口溫度比較圖

二、出口成份結果與比較

採用先前所建立之 FLUENT-CHEMKIN-Flamelet 模式以及 PDF 表格，並搭配設定好之邊界條件以及相關之物理模式及煤炭注射模式即可進行運算；本研究與修正前模型之主要差別為使用新建立之去揮發化物質($C_{11}H_{24}O_5$)來模擬，其燃料成分比例皆調整成與實驗值一致，而相關的網格獨立測試如圖 4-3、4-4 所示；網格獨立測試比較圖顯示十萬網格與十二萬網格出口組成之誤差皆已低於 1%，故為節省計算資源後續的參數將採用十萬網格來進行測試。

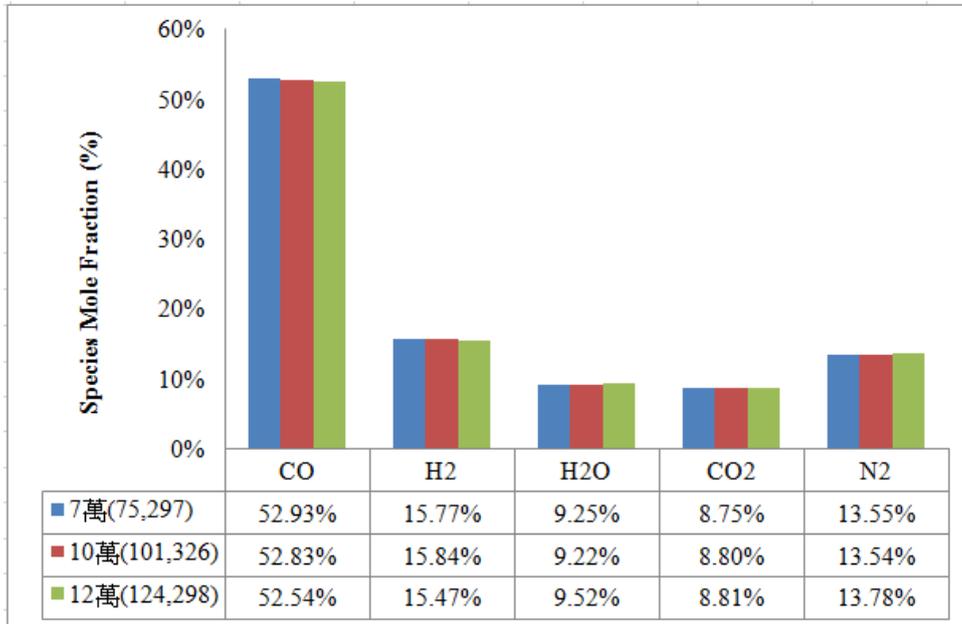


圖 4-3. 網格測試之出口成份結果比較圖

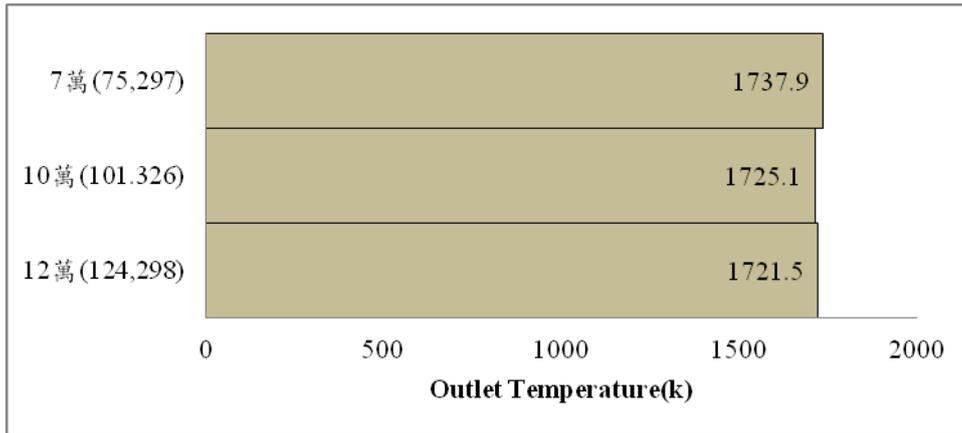


圖 4-4. 網格測試之出口溫度結果比較圖

而在計算時，將同時監視各物理量之殘餘值以及反應器出口氣體成份與溫度之變化，待殘餘值降低至一定程度，同時出口氣體與溫度達到皆穩定值時，即為收斂之結果。而所計算出之氣化爐出口各種主要成份，將與實驗量測之數據進行比對，以驗證此模式之可靠度，其比較結果如圖 4-5 所示：

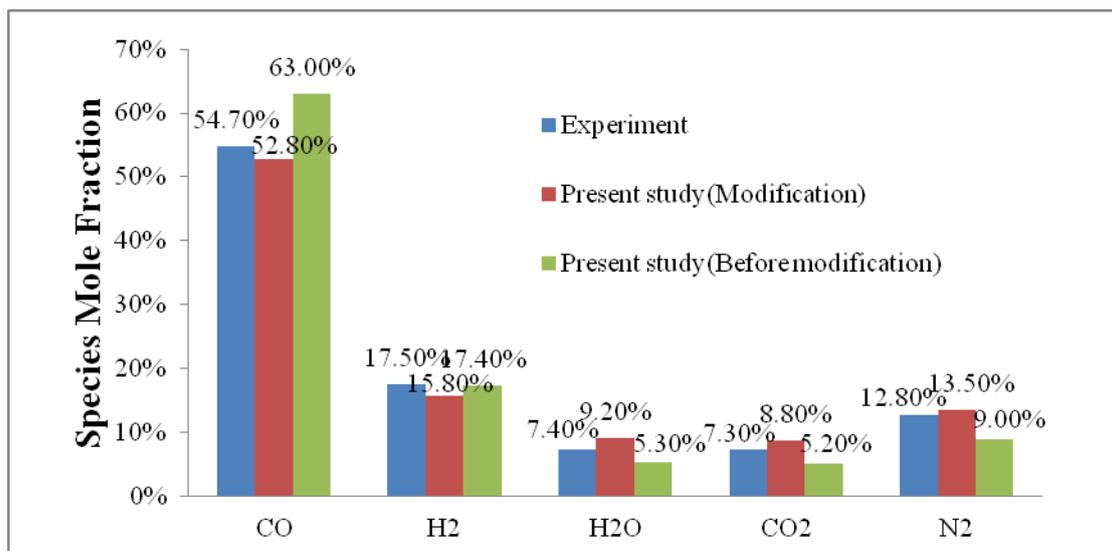


圖 4-5. 出口成份與實驗結果 [65] 比對

由此比對可知，氣化產生之混合氣體主要是以 CO 與 H₂ 為主，而燃燒反應之產物，即 CO₂ 與 H₂O 之比重則較低。這表示氣化爐內主要是進行氣化反應，而非燃燒反應，此趨勢即為氣化爐產氣之主要特性，故本分析模式能夠正確地模擬氣化爐之主要現象。在成份比對方面，整體平均之誤差約 1.52%，較修正前模型之誤差 3.15% 結果改善許多。而氣化爐內之溫度分佈圖，如圖 4-6 所示：

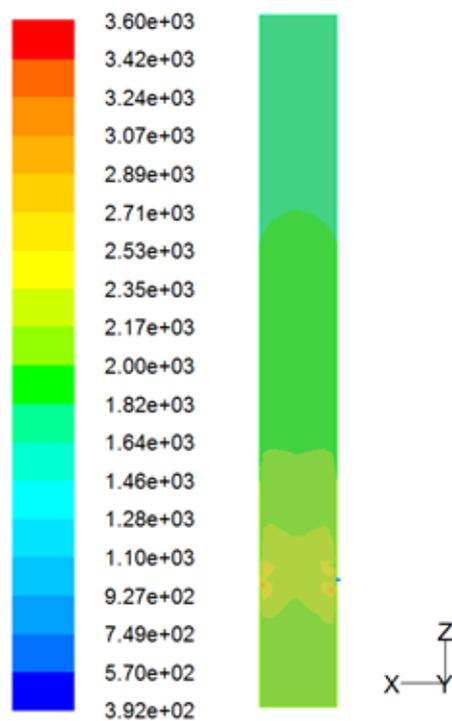


圖 4-6. 氣化爐沿軸向之溫度分佈圖

流動方向為由下往上，即為正 Z 之方向，高溫區即為燃料進給之處，其進給之方向為正 X 方向，即與反應器之外圍相切之處。反應

器內之最高溫約為燃料與氧化劑進料處，此區域主要是燃燒反應以提供後續氣化所需要之熱能，而燃燒反應只在燃料進給區域進行，故往下游區，氣化爐內之溫度則逐步降低，出口處約為 1725.1K 左右。在相關成份方面，圖 4-7 為氧氣之分佈圖：

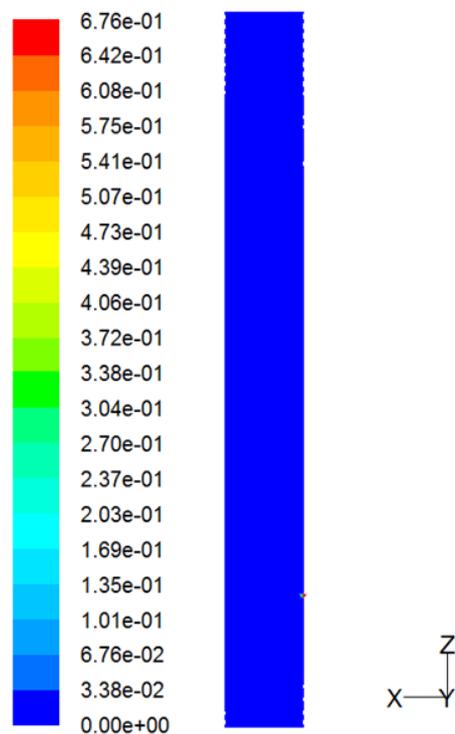


圖 4-7. 氣化爐沿軸向之氧氣分佈圖

由此氧氣分佈圖可知，在進氣區域附近，氧氣幾乎已消耗殆盡，故下游區方能進行缺氧情況下之氣化程序。而氧氣消耗主要是進行氧化反應，而爐內水蒸氣分佈如圖 4-8 所示：

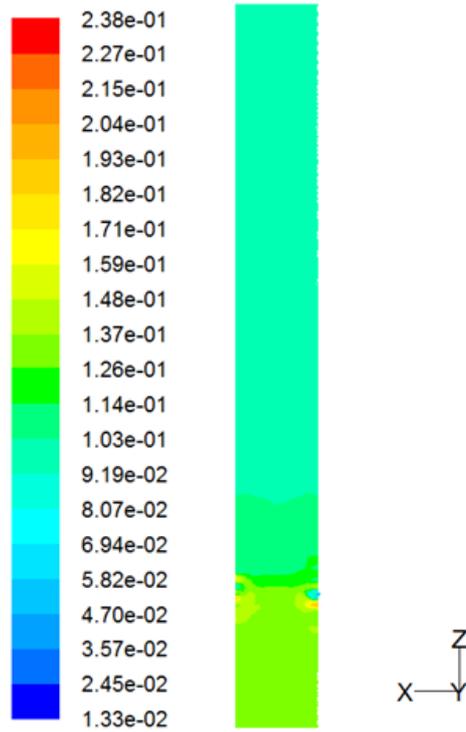


圖 4-8. 氣化爐沿軸向之水蒸氣分佈圖

相對應於氧氣之消耗，水蒸氣主要是在進氣區域產生，而下游區由於沒有氧氣可進行氧化反應，故下游區之水蒸氣則無明顯之變化。

圖 4-9 為 CO 之分佈圖：

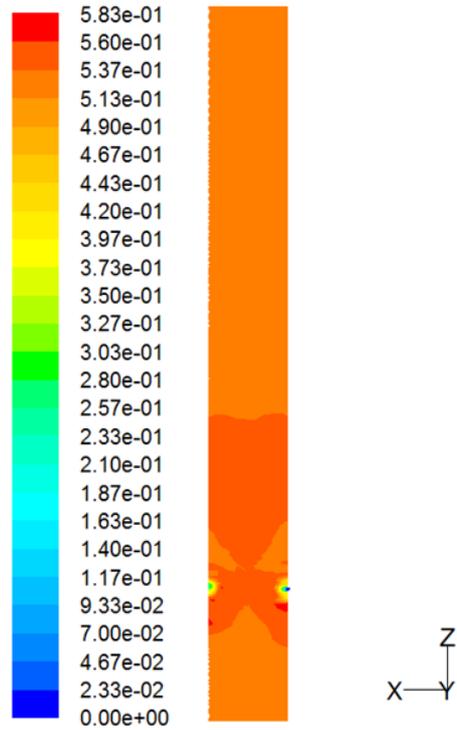


圖 4-9. 氣化爐沿軸向之一氧化碳分佈圖

進料區域之 CO 比例較少，往下游處則開始進行缺氧之氣化程序，故 CO 之比例先提高，後略為降低，於出口處則達到約為 52.8%。

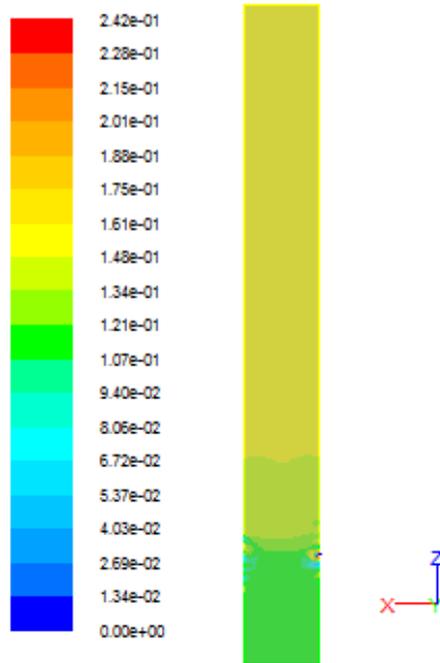


圖 4-10. 氣化爐沿軸向之氫氣分佈圖

而 H_2 之分佈情況，如圖 4-10 所示，則是與 CO 類似，於出口處則達到約為 15.8% 左右。

三、氣化爐分段進料之氣化效能評估

延用 FLUENT-CHEMKIN-Flamelet 之模型，以及新建立之去揮發化物質 $C_{11}H_{24}O_5$ ，來模擬二級進料系統之氣化爐分析結果，並與修正前之模型測試二級進系統模擬結果比較，其兩組二級進料系統與實驗值比較如圖 4-11 所示：

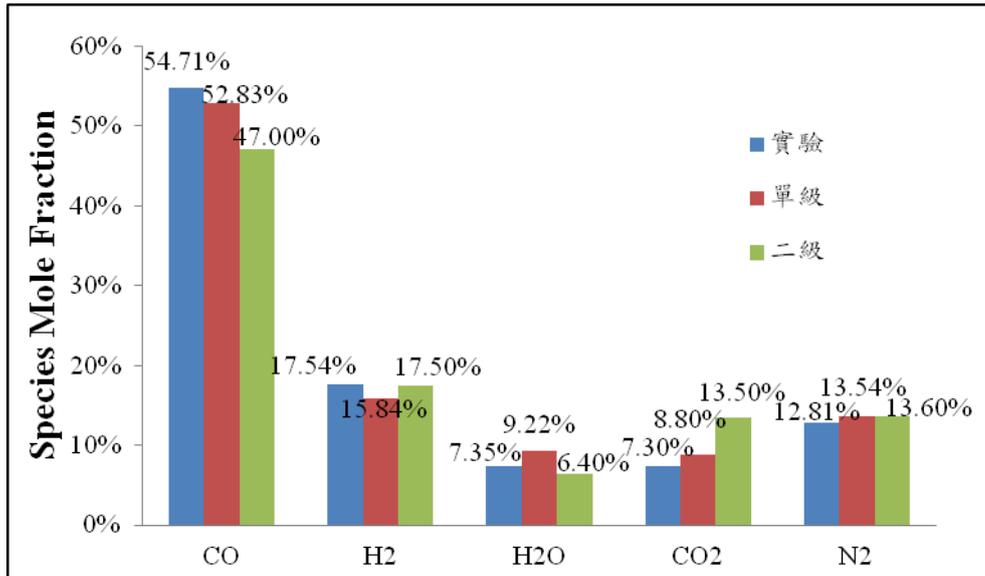


圖 4-11. 二級式進料之出口成份比較圖

由圖 4-11 可知，觀察可知改用此二級式的進料方式，與單級式進料(Base Case)結果比較可得，出口成分氫氣與二氧化碳提升，而一氧化碳與水氣則是下降。而在溫度分佈方面，圖 4-12 所示，第二級進料時會先進行部份燃燒反應造成溫度上升，之後經過氣化反應後溫度在快速下降，推斷為由於單級進料系統因進料較集中而產生之熱量主要在第一級的反應區，相較於二級進料系統，前段反應與單級相同，而第二級進料之燃料量較少與未反應完的氧化劑快速產生燃燒反應，下游則是進行氣化反應產生降溫，而氣化爐內部成份分佈如圖 4-13 所示，燃燒產物 CO₂ 與 H₂O 主要在第一級進料後產生下游因氣化反應逐漸減少，而氣化產物 CO 與 H₂ 則是在第二級進料後因氣化反應逐漸提升。由此部份結果可知，對相同成份之煤炭燃料而言，分

段進料燃料之比例調整，此操作模式對出口產氫效能有助於提升，相較於單級進氣(模擬)出口氫氣約提高 10%。

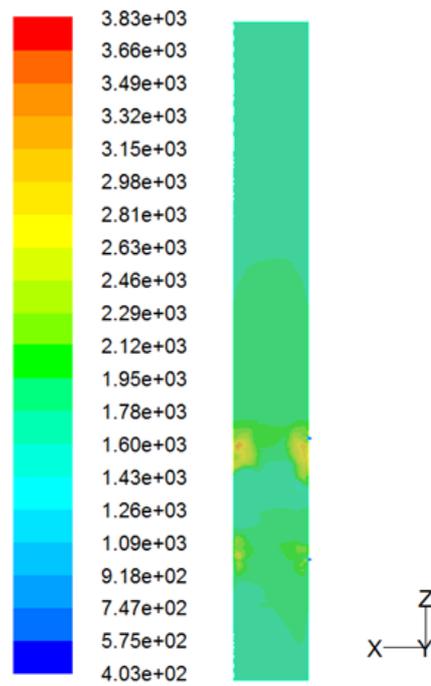


圖 4-12. 二級式進料氣化爐之內部溫度分布圖

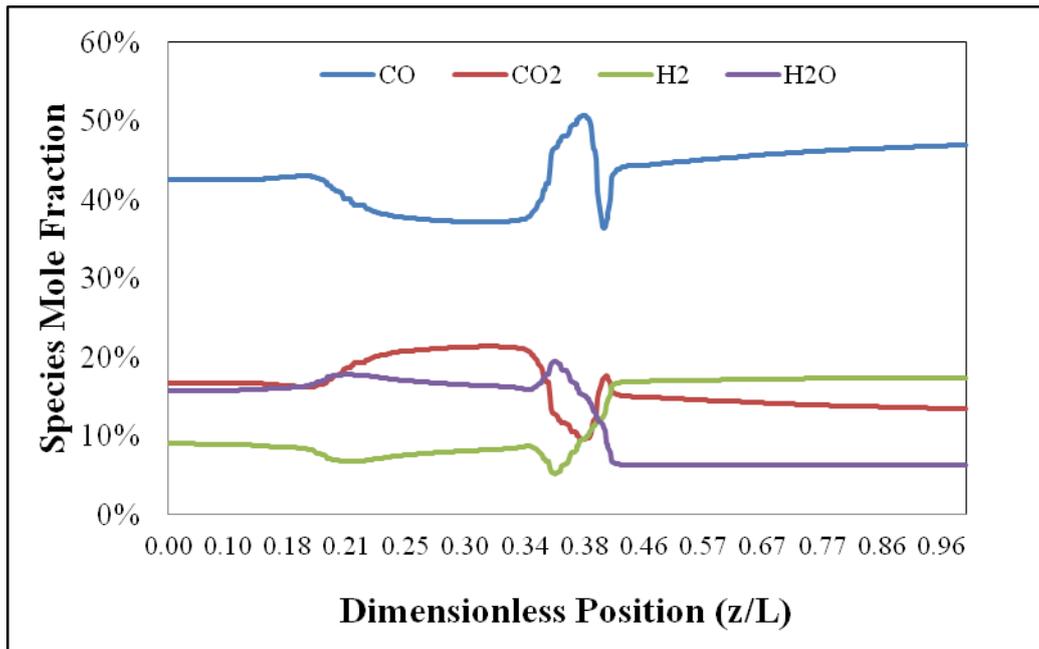


圖 4-13. 二級式進料氣化爐之內部成份比較圖

四、不同煤種之氣化效能分析

在不同煤種之測試部份，採用文獻上之兩種煤炭[70]，使用 FLUENT-CHEMKIN-Flamelet 之模型，且將整體入口 O_2/C 比例固定和原大陸神華煤相同之 1.361 比例，來模擬不同煤種之氣化效能，並與原大陸神華煤之模擬結果做比較。其結果比較如圖 4-14、15 所示：

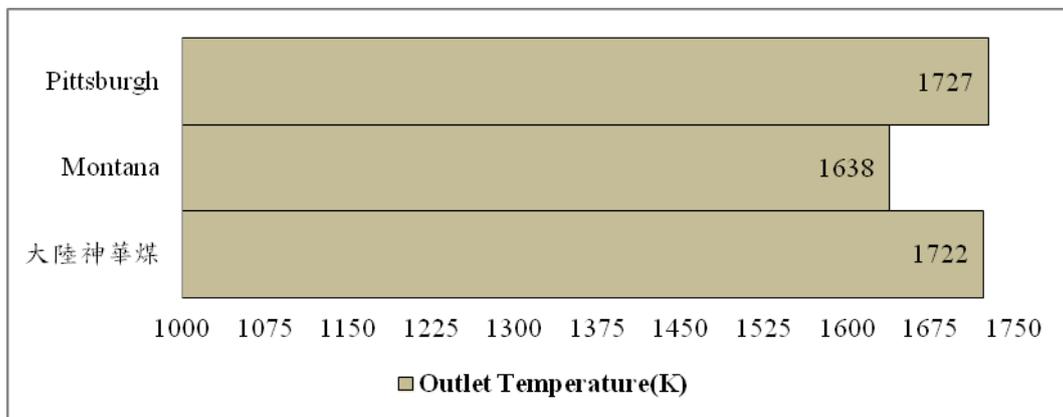
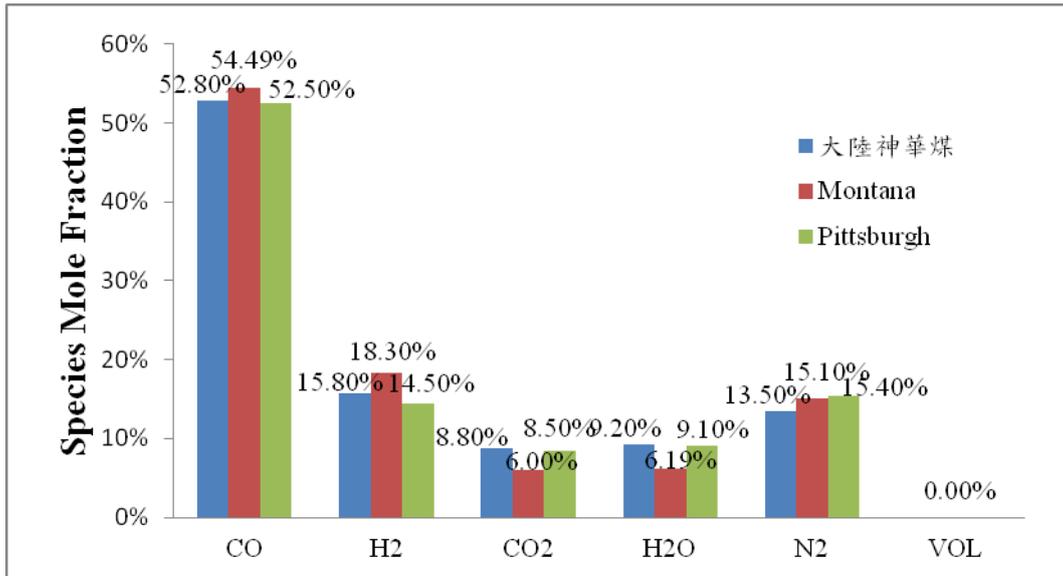


圖 4- 14.不同煤種之出口成份及溫度圖

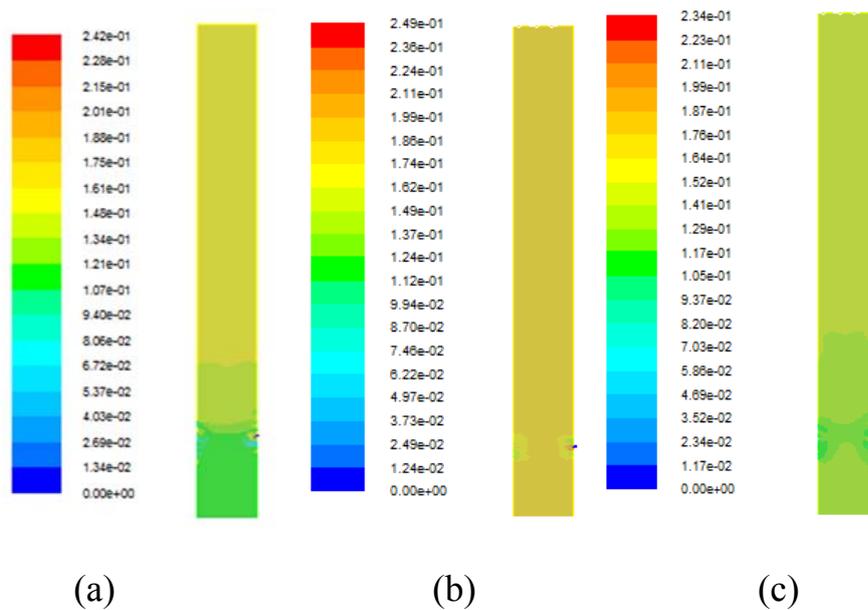


圖 4- 15.採用(a)大陸神華煤，(b)Montana 煤，(c)Pittsburgh 煤進行氣

化之爐內氫氣分佈圖

由結果得知，在固定 O_2/C 比例下，不同煤種測試結果可知，出口產物在氫氣與一氧化碳部份，以 Montana 煤所佔比例較高，而二氧化碳出口量則是三者最低。若以 CO 之質流率進行比較可發現，採用神華煤氣化所獲得之 CO 質流率(0.0327 kg/s)高於另兩者之結果(Montana 煤為 0.0304 kg/s，Pittsburgh 煤為 0.0289 kg/s)。由此測試結果可發現，當進料變更後，其操作條件可能需要隨之進行調整。如此才能將進料之使用效率提升至最佳化。

五、EDC+CHEMKIN 之基礎模型

EDC(Eddy Dissipation Concept)模型是在紊流中考慮細節的化學機制，其中假設化學反應在一個小範圍區域(Fine Scales)，經過一時間長度(Time Scale)來計算此區域的化學反應所生成或減少的量，而輸入之同相與異相化學反應動力式如前述八條(Eqs. 26-33)，而匯入至 FLUENT 之 CHEMKIN 檔案分為氣相反應與表面反應，如圖 4-16 所示：

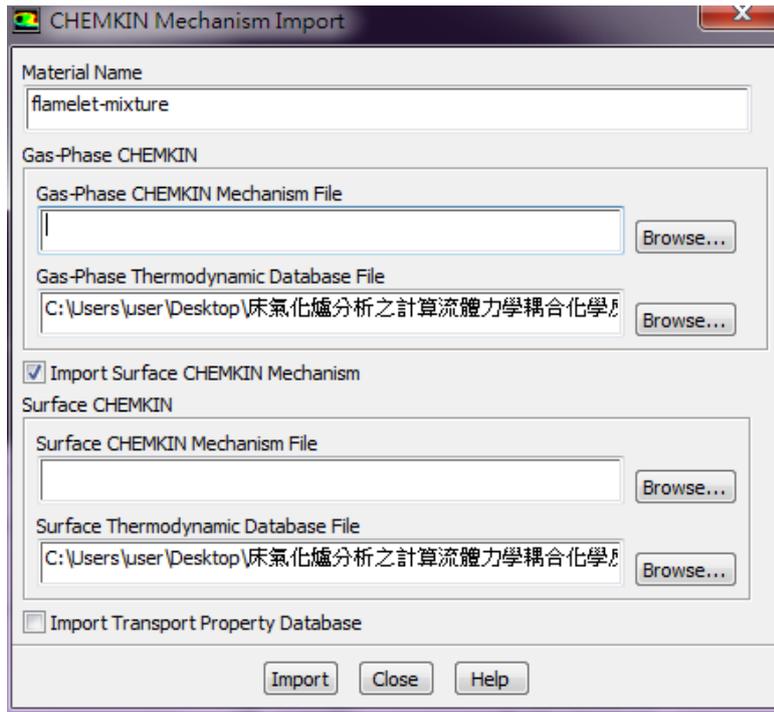


圖 4- 16. FLUENT 匯入 CHEMKIN 反應機制之介面圖

由於使用 EDC 模型來計算需要龐大的計算資源，故為了節省計算資源與計算時間。將使用 Non-premixed 之 Steady Flamelet 的 case 與 data 作為 EDC 模型之初始猜值，即是先固定流場及紊流來求解成份和溫度方程式。待其殘餘值達收斂標準後再將流場及紊流之效應開啟繼續求解，如圖 4-17 所示，使整體流場與成份進行調整修正，最後達到收斂。



圖 4-17. EDC 模型之流場與紊流固定和開啟示意圖

而整體 EDC 模型之運算程序如下：

- (1) 使用 Non-premixed 之 Steady Flamelet 的 case 與 data 作為初始猜
值。
- (2) 輸入 CHEMKIN 格式之化學反應機制。
- (3) 將 Non-premixed Model 改為 Species Model 並將其紊流耦合化學
機制之選項改為 Eddy-Dissipation-Concept (EDC)。
- (4) 設定邊界條件。
- (5) 關閉流場與紊流之方程式，先求解成分與溫度之方程式。
- (6) 待其殘餘值達收斂標準後再將流場及紊流之效應開啟，使整體流
場與成份進行調整修正，最後達到收斂及討論其結果。

六、EDC 之+ISAT 之結果比較

再修正反應式之參數值前之結果比較，如圖 4-18 所示：

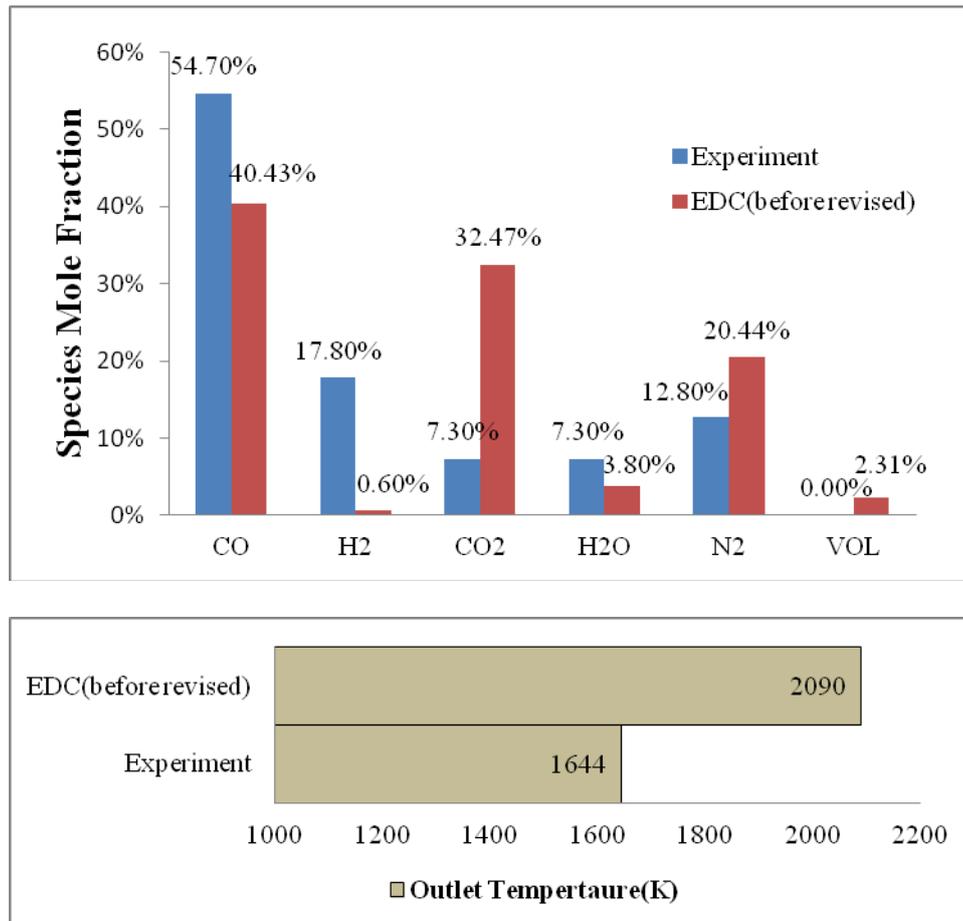


圖 4- 18.反應式前之 EDC 結果

由結果可知，反應參數影響整體結果很大，故修正成 FLUENT 裡符合單位的參數，為必要之步驟。

而測試後發現，EDC 在成份守恆上有很大問題。而因為 EDC 本身計算緩慢，且加上本研究含有煤炭粒子之離散相和連續相做化學性質交換。為增加運算速度，成份部份先採用氣相進入，雖不合物理意義，但目的為找出其運算守恆性及其它反應參數。設定如圖 4-19 所示：

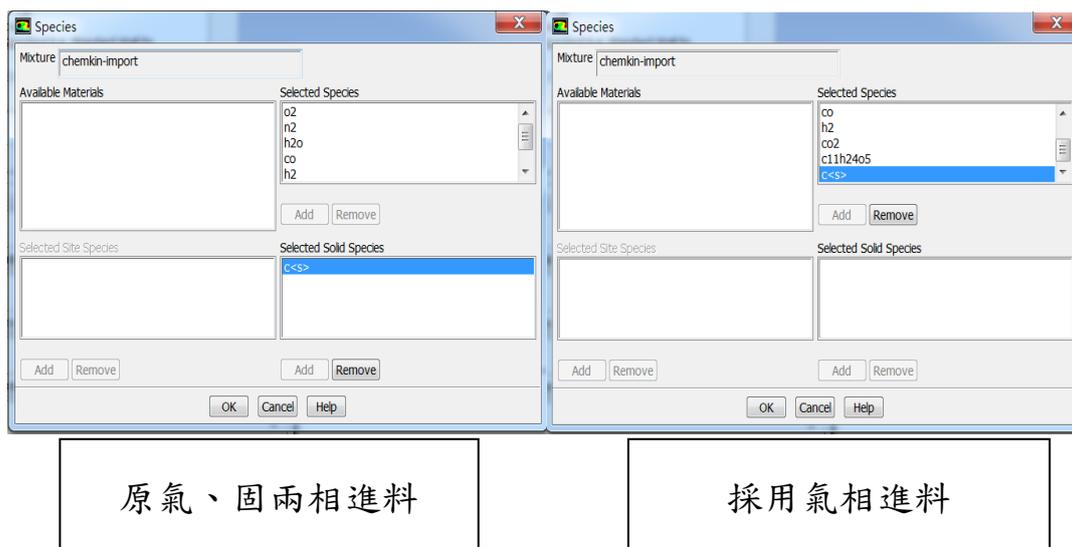


圖 4-19.暫時修正為氣相進料之設定圖

經過氣相進料測試，發現反應動力式的參數影響守恆及出口成份非常顯著。且因參考文獻所載明之單位不同，故本研究先將表示單位進行統一(其為調整反應動力參數值之重要關鍵)。氣相及固(異)相單位如下表 4-1、4-2：

表 4- 1.FLUENT 內氣相反應式單位

Volumetric Reaction Parameter	Unit in FLUENT
C (molar concentration)	[kgmol/m ³]
A (pre-exponential factor)	[(kmol/m ³) ^{1-m} /s]
Ea (activation energy)	[j/kgmol]
R (gas constant)	[j/kgmol.K]
m= Sum of Stoichiometric Coefficient of Reactant	

表 4- 2.FLUENT 內異(固)相反應式單位

Surface Reaction Parameter	Unit in FLUENT
A (pre-exponential factor)	$[(\text{kg}/\text{m}^2)^{1-m}/\text{s}]$
Ea (activation energy)	[j/kgmol]
\bar{R} (rate of particle species depletion)	[kg/s]
m= Sum of Stoichiometric Coefficient of Reactant	

最後，將相關文獻進行整理、換算後，可得到如下表所示之反應參數：

表 4- 3. 參考文獻換算後之反應參數值

反應式	A	Ea	Reference
(30)	3.98E+11	1.672E+08	[66]
(31)	5E+05	1.672E+08	[66]
(32)	1.8E+10	1.4644E+08	[67]
(33)	2.75E+09	8.36E+07	[68]
(34)	0.57691	1.33E+07	[54]
(35)	0.81211	1.125E+08	[54]
(36)	0.86758	1.15E+08	[54]

經過換算成 FLUENT 單位格式後匯入重新計算，其反應常數修正後之 EDC 出口結果比較，如圖 4-20：

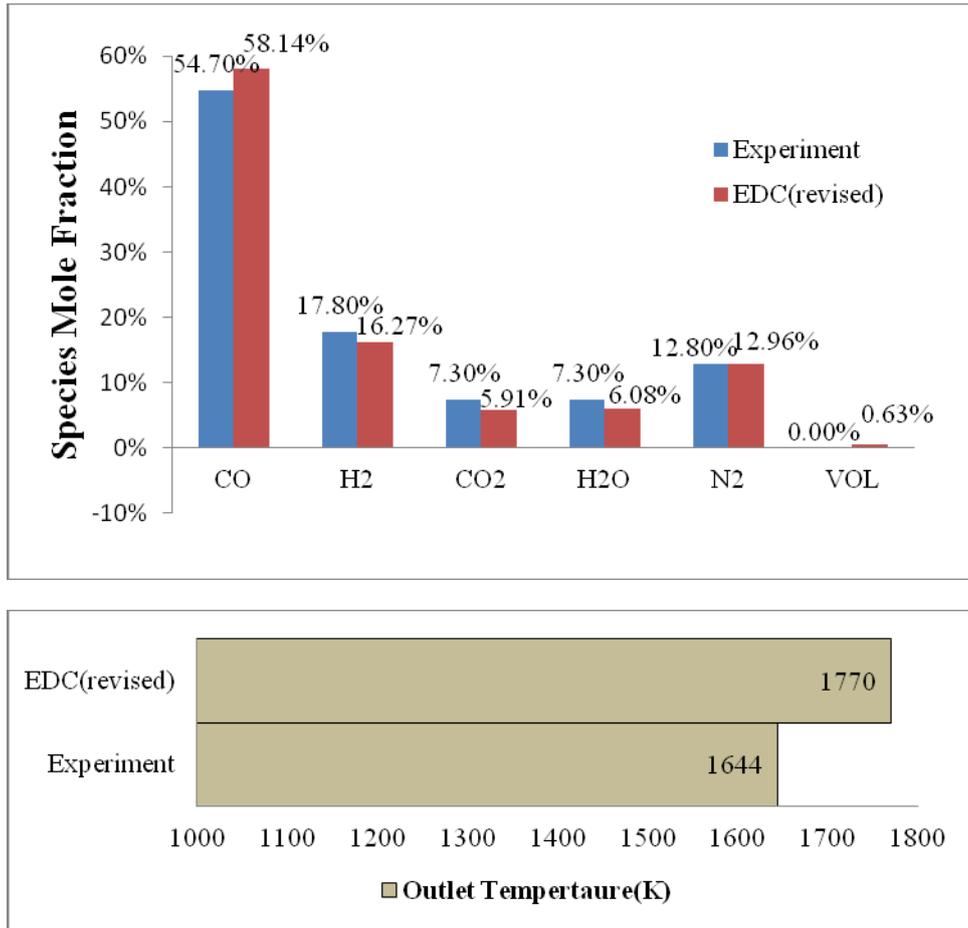
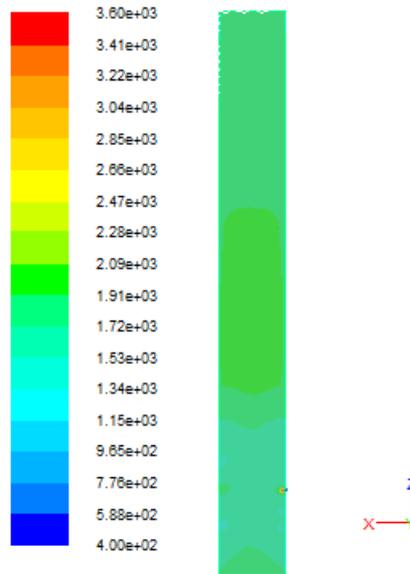


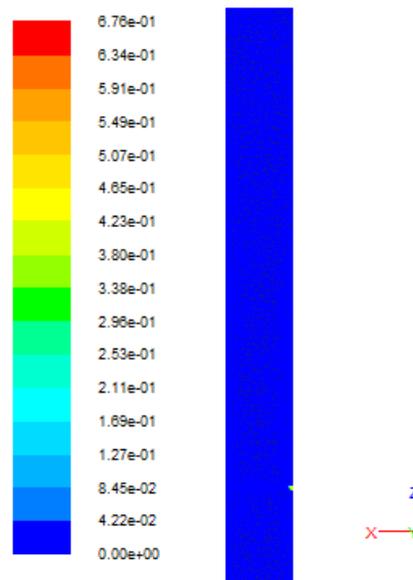
圖 4- 20.EDC 出口結果圖

由此比對可知，氣化產生之混合氣體主要是以 CO 與 H₂ 為主，而燃燒反應之產物，即 CO₂ 與 H₂O 之比重則較低。這表示氣化爐內主要是進行氣化反應，而非燃燒反應。此趨勢即為氣化爐產氣之主要特性，故採用 EDC 模式能夠模擬氣化爐之主要現象。在成份比對方面，整體相對誤差約 7.4%，而氣化爐內溫度分佈及各成份分佈圖(4-21 至 4-26)，如下：



Contours of Static Temperature (k)

圖 4- 21.氣化爐沿軸向之溫度分佈圖

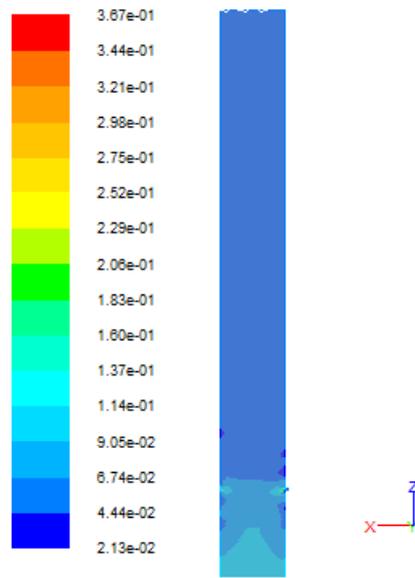


Contours of Mole fraction of o2

圖 4- 22.氣化爐沿軸向之氧氣分佈圖

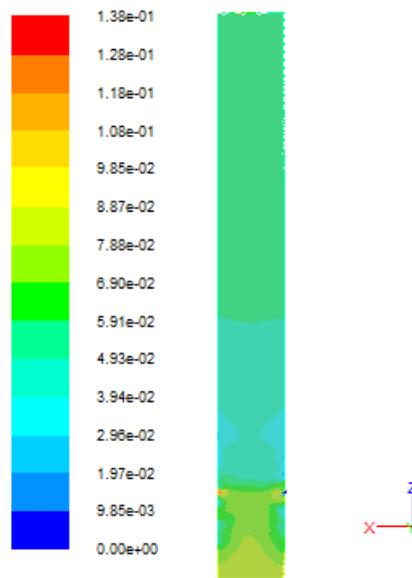
由此氧氣分佈圖 4-22 可知，在進氣區域附近，氧氣幾乎已消耗殆盡，故下游區方能進行缺氧情況下之氣化程序。而氧氣消耗主要是進行氧化反應，而氧化反應產生之水蒸氣及二氧化碳如圖 4-23、4-24

所示：



Contours of Mole fraction of h2o

圖 4- 23.氣化爐沿軸向之水蒸氣分佈圖

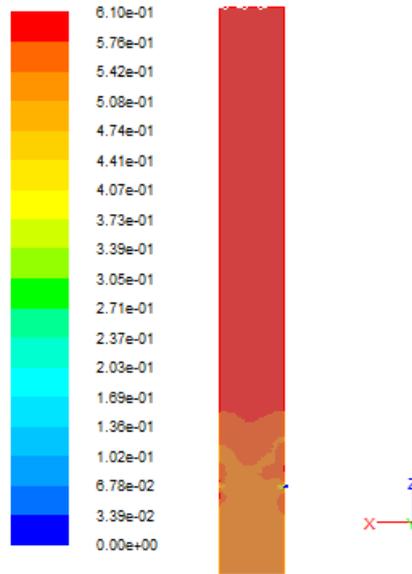


Contours of Mole fraction of co2

圖 4- 24.氣化爐沿軸向之二氧化碳分佈圖

相對應於氧氣之消耗，水蒸氣主要是在進氣區域產生，而下游區由於沒有氧氣可進行氧化反應，故下游區之水蒸氣則無明顯之變化。

圖 4-25 為 CO 之分佈圖：



Contours of Mole fraction of co

圖 4-25.氣化爐沿軸向之一氧化碳分佈圖

進料區域之 CO 比例較少，往下游處則開始進行缺氧之氣化程序，故 CO 之比例逐漸增加，於出口處則達到約為 58%。

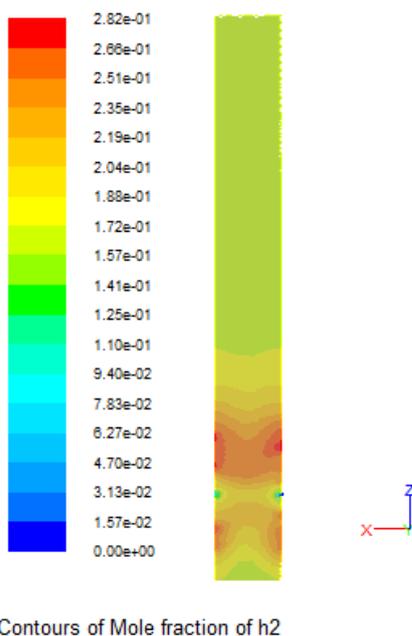


圖 4- 26.氣化爐沿軸向之氫氣分佈圖

而 H_2 之分佈情況，如圖 4-26 所示，則是與 CO 類似，於出口處則達到約為 16% 左右。

由結果可得知，目前 EDC 模擬結果趨勢與實驗值接近，出口氣體為氣化成份為主(CO 、 H_2)，而非燃燒反應之產物(CO_2 、 H_2O)，但不到準確。推斷為 EDC 雖為目前考慮詳細化學反應和紊流耦合的最完整方法，但如文獻裡 Rehm[71] 等人，研究 EDC 模型中之參數，對於整體模擬出口誤差影響分析。其影響參數諸如前面提到之體積分率常數與時間尺度常數值並無實驗依據做為搭配，只能依賴敏感度測試進行調整。故模擬結果有符合實驗值之趨勢，但尚不到精準程度。而因 EDC 燃燒模型出口成份相對誤差值在 7.4% 左右，比 Flamelet 模型的出口成份誤差 1.52% 還高。故在採用相同條件下，現階段之 EDC

模型較 Flamelet 模型誤差大且不精準。後續將進行 EDC 模型精進工作，以獲得更精確之數值分析模型。

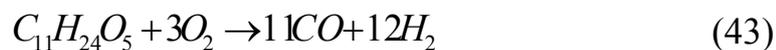
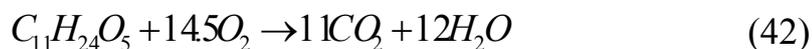
(三) EDC 揮發物之反應式測試部分：

為測試揮發物反應式是否對整體反應有影響，採用兩種揮發物反應式對出口結果來做比較，分為以下兩種：

1. 採用燃燒反應式(Combustion)，為目前本研究採用之揮發物反應



2. 採用兩者，氣化及燃燒反應式(Combustion & Gasification)



而出口成份及溫度如下圖 4-27：

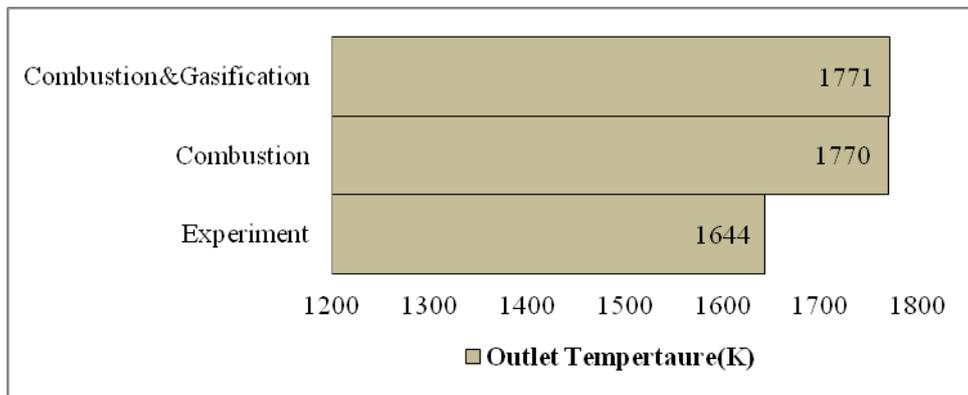
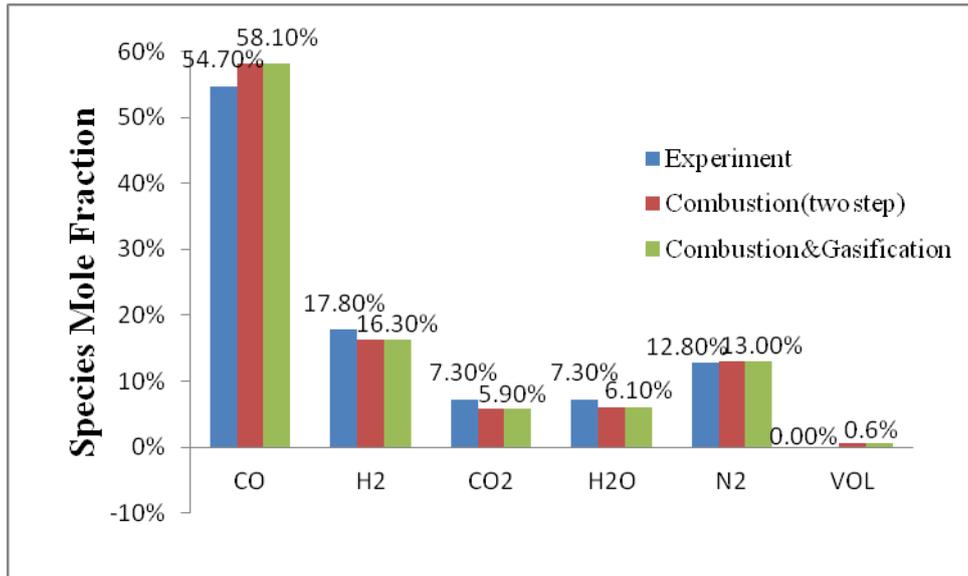


圖 4- 27.改變 EDC 揮發物反應式之出口成份及溫度圖

而由結果可得知，改變揮發物反應式，對整體出口結果無改變(除了溫度在四捨五入上，有 1K 的變化)。推斷原因為，因揮發物反應之後的氣體會在爐內達到平衡，而非主要影響出口結果，故不會造成氣化爐之出口結果改變。

伍、結論

本研究以泛用型商用軟體 FLUENT，針對挾帶床式氣化爐建立分析模式，本計畫已完成之工作項目包括：建立二級進料系統之氣化爐幾何模型；建立冷流場與紊流模式；建立流場與粒子之熱輻射模式；建立煤炭噴注系統以及粉煤裂解模式；導入離散相模式；與實驗之出口氣體成份進行比對；不同煤種之氣化比較；以及 EDC+CHEMKIN 之基礎模型與運算程序建立等。重要結論分述如下：

- 一、在修正先前建立之模型之加水之參數測試上，當煤炭之含水比例提高後，氫氣、水氣與二氧化碳之比例亦隨之增加，一氧化碳則是隨之下降。其原因為加水後部分 H_2O 與一氧化碳進行水氣轉換反應生成氫氣和二氧化碳，而另一部分未反應則使出口水氣比例增加。故在煤炭含水之比例增加，有助於提升出口產氫之效能。經四組參數測試結果發現產氫部分會有一定比例值；而出口溫度會隨加水比例提高而下降，是因加水會導致冷卻的效果。而隨著煤炭加水之比例增加，PDF 所計算出來之可能最高溫度也隨之降低，故造成出口溫度隨著加水比例增加而下降。

- 二、在與實驗結果比較方面，氣化爐產生之合成氣之中，主要是以

CO 與 H₂ 為主，此趨勢與氣化爐實際運行之結果一致；O₂ 是在入口區則耗盡，並產生高溫氣體，CO 與 H₂ 則是在下游處產生。而與實驗比較可知，採用此新建立之去揮發化物質(C₁₁H₂₄O₅)，各成份之比重之趨勢與實驗結果一致，各成份誤差約為 1.5% 左右。而此新入口成分與化學反應動力式，較修正前模型之模擬結果比對，能更精準的模擬各出口成份之比例與實驗值之誤差。而此組基礎模型將當成參考之 Base Case，作為後續之參數測試以及 EDC 模型的初始猜值來加快運算速度。

三、在二級進料系統之氣化爐方面，單級式進料(Base Case)結果，其出口成分氫氣與二氧化碳有提升，而一氧化碳與水氣則是下降。由此結果可知，對相同成分之煤炭燃料而言，分段進料燃料與氧化劑之比例調整，此操作模式對出口產氫效能有助於提升。相較於單級進氣出口氫氣約可提高 10%，而出口溫度則是會降低。

四、進行不同煤種之參數測試結果 (Flamelet)：在不同煤種之氣化效能評估方面，神華煤能產出最多之 CO。而在出口溫度方面，Montana 煤出口溫度較三者低。

五、EDC-ISAT 之架構模型、參數之應用，在本研究中已建立基礎參

數設定，且基礎分析模型已建立完成。

六、EDC-ISAT 之架構模型及運算程序已建立，與實驗值結果比對方面，結果接近但未達準確。推論為 EDC 為考慮細微化學反應之機制，且從研究結果中發現，反應參數影響整體結果顯著，為整體反應中之重要因素。此亦為本研究投注於導入 EDC 之原因，希冀藉由更詳盡之化學反應協助，建立更精準之分析模式。

七、EDC-ISAT 在揮發物反應式測試方面，因揮發物反應之後的氣體會在爐內達到平衡，故幾乎不影響氣化爐之出口結果。

八、比對 Flamelet 及 EDC 模型之後，可發現 Flamelet 在模擬出口成份及溫度上比 EDC 精準外，所需要之運算時間及資源也較 EDC 少許多。故以這兩種模型來比較，Flamelet 現階段能較精準地計算出氣化之結果。唯 EDC 模型現階段未臻完善地步，後續將進行精進作業，待獲得較完善之模型後，再進行兩種模型之比較工作。

參考文獻

1. Hinrichs RA and Kleinbach M, Energy: Its Use and the Environment
Harcourt, Inc., (2002).
2. Ristinen RA and Kraushaar JJ, Energy and the Environment, Wiley,
New York, (1999).
3. Ruth LA, "Energy from Municipal Solid Waste: A Comparison with
Coal Combustion Technology", Prog. Energy Combust. Sci., vol.24,
pp.545-564, (1998).
4. BP, "Statistical Review of World Energy", (June 2011).
5. DOE, "Commercial-Sale Demonstration of the Liquid Phase
Methanol (LPMEOH) Process", FETC, (2000).
6. 洪福亮, "煤炭氣化技術之應用", (2001).
7. 經濟部能源局, 能源統計手冊, (2008).
8. www.power-technology.com/projects/isab/isab1.html, (2011/03/08
accessed)
9. Kivisaari T, "The Feasibility of a Coal Gasifier Combined with a
High-Temperature Fuel Cell", pp.2, Figure 1, (2003).

10. 工研院能資所研究報告, "氣化複循環發電技術引進的策略規劃", (1999).
11. 台電電力綜合研究所研究報告, "煤炭氣化技術及淨化技術之研究", (1994).
12. www.fossil.energy.gov/programs/powersystems/gasification/index, (2011/03/08)
13. 周至成, 賴維祥 and 劉軒誠, "石油焦於固定床式氣化爐之氣化研究", 民航/航太/燃燒學術聯合會議, (2002).
14. 陳維新, 陳建中, 蔡慶達, 陳建勳, 吳世豐 and 宋勁賢, "固定床氣化爐中煤炭氣化之探討", 中華民國燃燒學會第十三屆學術研討會, pp.81, (2003).
15. 徐恆文, "煤炭氣化發電之能源優勢", 工業技術研究院, (2004).
16. Smoot LD and Pratt DT, "Pulverized-Coal Combustion and Gasification Theory and Applications for Continuous Flow Processes", (1979).
17. 周志成, "石油焦氣化技術研究", 國立成功大學航空太空工程研究所碩士論文, (2002).

18. Smoot LD and Smith PJ, "Coal Combustion and Gasification", Plenum Press, New York, (1985).
19. Tree DR, Black DL, Rigby JR, McQuay MQ and Webb BW, "Experimental Measurement in the BYU Controlled Profile Reactor", Prog. Energy Combsut. Sci., vol.24, pp.355-383, (1998).
20. 鍾文清, "IGCC 發電方式簡介", 技術與訓練, vol.23(6), pp.127~133, (1998).
21. Anthony DB and Howard JB, "Coal Devolatilization and Hydrogasification", AIChE J., vol.22, pp.625-656, (1976).
22. Agarwal PK, "A Single Particle Model for the Evolution and Combustion of Coal Volatiles", Fuel, vol.65, pp.803-810, (1986).
23. Ni Q and Williams A, "A Simulation Study on the Performance of an Entrained-Flow Coal Gasifier", Fuel, vol.74, pp.1257, (1995).
24. Biba V, Macek J, Klose E and Malekha I, "Mathematical Modeling of the Gasification of Coal Under Pressure in a Stationary Bed", Solid Fuel Chemistry (English Translation of Khimiya Tverdogo Topliva), vol.11(5), pp.63-71, (1997).
25. Ruprecht P, Schafer W and Wallace P, "A computer model of entrained coal gasification", Fuel, vol.67, pp.121, (1988).

26. Vamvuka D, Woodburn E and Senior P, "Modeling of an Entrained Flow Coal Gasifier: 1. Development of the Model and General Predictions", *Fuel*, vol.74, pp.1452-1460, (1995).
27. Smoot LD, "Coal Gasification", *Encyclopedia of Energy Technology and the Environment*, vol.4, pp.769-792, (1995).
28. Wen CY and Chaung TZ, "Entrainment Coal Gasification Modeling", *Ind. Eng. Chem. Process Des.*, vol.18, pp.684-695, (1979).
29. Govin R and Shah J, "Modeling and Simulation of an Entrained Flow Coal Gasifier", *AIChE J.*, vol.30, pp.79-92, (1984).
30. Sprouse KM, "Modeling Pulverized Coal Conversion in Entrained Flow", *AIChE J.*, vol.26 No.6, pp.964-975, (1980).
31. Nicholas RS, Smoot LD and Hedman aPO, "Entrained Flow Gasification of Coal 1. Evaluation of Mixing and Reaction Processes From Local Measurements", *Fuel*, vol. 64, pp.776-781, (1985).
32. Neogi D, Chang CC, Walanwender WP and Fan LT, "Study of Coal Gasification in an Experimental Fluidized-Bed Reactor", *AIChE J.*, vol.32, pp.17-28, (1986).
33. Brown BW, Smoot LD, Smith PJ and Hedman PO, "Measurement and Prediction of Entrained Flow Gasification Processes", *AIChE J.*, vol.34, No.3, pp.435-446, (1988).

34. Smoot LD and Brown BW, "Controlling Mechanisms in Gasification of Pulverized Coal", *Fuel*, vol. 66, pp.1249-1256, (1987).
35. Kim YJ, Lee JM and Kim SD, "Coal Gasification Characteristics in an Internally Circulating Fluidized Bed With Draught Tube", *Fuel*, vol. 76, No. 11, pp. 1067-1073, (1997).
36. Chen C, Horio M and Kojima T, "Numerical Simulation of Entrained Flow Coal Gasifiers. Part 1: Modeling of Coal Gasification in an Entrained Flow Gasifier", *Chemical Eng. Sci.*, vol.55, pp.3861-3874, (2000).
37. Chen C, Horio M and Kojima T, "Numerical Simulation of Entrained Flow Coal Gasifiers. Part 2: Effects of Operating Conditions on Gasifier Performance", *Chemical Eng. Sci.*, vol.55, pp.3875-3883, (2000).
38. Chen C, Horio M and Kojima T, "Use of Numerical Modeling in the Design and Scale-up of Entrained Flow Coal Gasifiers", *Fuel*, vol.80, pp. 1513-1523, (2001).
39. Liu GS, Rezaei HR, Lucas JA, Harris DJ and Wall TF, "Modeling of a Pressurized Entrained Flow Coal Gasifier: The Effect of Reaction Kinetics and Char Structure", *Fuel*, vol.79, pp.1767-1779, (2000).
40. Choi YC, Li XY, Park TJ, Kim JH and Lee JG, "Numerical Study on the Coal Gasification Characteristics in an Entrained Flow Coal

Gasifier", Fuel, vol.80, pp.2193-2201, (2001).

41. Wall TF, Liu G-s, Wu H-w, Roberts DG, Benfell KE, Gupta S, Lucas JA and Harris DJ, "The Effects of Pressure on Coal Reactions During Pulverised Coal Combustion and Gasification", Progress in Energy and Combustion Science, vol. 28(5), pp.405-433, (2002).
42. Skodras G, Kaldis SP, Sakellarpoulos GP, Sofialidis D and Faltsi O, "Simulation of a Molten Bath Gasifier by Using a CFD Code", Fuel, vol.82(15-17), pp.2033-2044, (2003).
43. Zhong W, Zhang M, Jin B and Yuan Z, "Three-Dimensional Simulation of Gas/Solid Flow in Spout-Fluid Beds with Kinetic Theory of Granular Flow", Chinese Journal of Chemical Engineering, vol.14(5), pp.611-617, (2006).
44. Silaen A and Wang T, "Simulation of Coal Gasification Inside a Two-Stage Gasifier", (2005).
45. Wang T, Silaen A, Hsu HW and Lo MC, "Part-Load Simulations and Experiments of a Small Coal Gasifier", (2006).
46. Silaen A and Wang T, "Effects of Fuel Injection Angles on Performance of A Two-Stage Coal Gasifier", (2006).
47. Syred N, Kurniawan K, Griffiths T, Gralton T and Ray R, "Development of fragmentation models for solid fuel combustion and

- gasification as subroutines for inclusion in CFD codes", *Fuel*, vol.86(14), pp.2221-2231, (2007).
48. Perkins G and Sahajwalla V, "Modelling of Heat and Mass Transport Phenomena and Chemical Reaction in Underground Coal Gasification", *Chemical Engineering Research and Design*, vol.85(3), pp.329-343, (2007).
49. Grabner M, Ogriseck S and Meyer B, "Numerical Simulation of Coal Gasification at Circulating Fluidised Bed Conditions", *Fuel Processing Technology*, vol.88(10), pp.948-958, (2007).
50. Wang T, Silaen A, Hsu HW and Shen CH, "Effect of Slag Tap Size on Gasification Performance and Heat Losses in a Quench-Type Coal Gasifier", (2007).
51. Wang T, Silaen A, Hsu HW and Shen CH, "Investigation of Heat Transfer and Gasification of Two Different Fuel Injectors in an Entrained Flow Gasifier", (2008).
52. Wang QW, Liu P, Xu S and Wang B, "A Parametric Study to Design an Effective Spray Cooling Deployment in an Entrained-Flow Coal Gasifier", (2008).
53. Wang T and Silaen A, "Effects of Turbulence and Devolatilization Models on Gasification Simulation", (2008).

54. Ajilkumar A, Sundararajan T and Shet USP, "Numerical Modeling of a Steam-Assisted Tubular Coal Gasifier", International Journal of Thermal Sciences, vol.48(2), pp.308-321, (2009).
55. Wang T and Silaen A, "Comparison of Instantaneous, Equilibrium, and Finite-rate Gasification Models in an Entrained-Flow Coal Gasifier", IPCC, (2009).
56. 洪孟逸, "挾帶床煤炭氣化之模擬", 國立中山大學機械工程研究所碩士論文, (1993).
57. 周可仲, "含觸媒焦炭在氣固流體化床氣化反應的實驗探討", 大同大學化學工程研究所碩士論文, (2001).
58. 吳建彤, "氣化燃氣燃燒流場之數值模擬分析", 國立成功大學航空太空工程研究所碩士論文, (2002).
59. 楊家瑋, "粉煤氣化之數值模擬分析", 國立成功大學航空太空工程研究所碩士論文, (2003).
60. 郭家豪, "粉煤氣化之三維數值模擬分析", 國立成功大學航空太空工程研究所碩士論文, (2005).
61. Launder BE and Spalding DB, "Lectures in Mathematical Models of

- Turbulence", Academic Press, London, England, (1972).
62. Morsi SA and Alexander AJ, "An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow Systems", J. Fluid Mech., vol.55(2), pp.193-208, (1972).
 63. Cheng P, "Two Dimensional Radiating Gas Flow by a Moment Method", AIAA, pp.1662-1664, (1964).
 64. Ranz WE and Marshall WR, "Evaporation from Drops. Part 1", vol.48(3), pp.141-146, (1952).
 65. 徐恆文, "Private Communication", 財團法人工業技術研究院:能源與資源研究所—潔淨能源技術組燃料應用研究室, (2005).
 66. Westbrook CK and Dryer FL, "Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames", Combustion Science and Technology, vol.27, pp.31-43, (1981).
 67. Marinov NM, Westbrook CK, and Pitz WJ, "Detailed and Global Chemical Kinetics Model for Hydrogen", pp.10-10, (1995)
 68. Jones WP and Lindstedt RP, "Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion", Combustion and Flame, vol.73(3), pp.233-249. (1988)
 69. Gran IR and Magnussen BF, "A Numerical Study of a Bluff-Body

Stabilized Diffusion Flame. part 2. Influence of Combustion Modeling and Finite-rate Chemistry," Combustion Science and Technology ,vol.119, pp.191-217, (1996)

70. McLendon TR, Lui AP, Pineault RL, Beer SK and Richardson SW, "High-Pressure Co-Gasification of Coal and Biomass in a Fluidized Bed", Biomass and Bioenergy, vol.26(4), pp.377-388,(2004)

71.Rehm M, Seifert P and Meyer B, "Theoretical and Numerical Investigation on the EDC-Model for Turbulence–Chemistry Interaction at Gasification Conditions", Computers and Chemical Engineering,vol.33, pp.402-407, (2009)