

行政院原子能委員會
委託研究計畫研究報告

氣化爐操作參數分析與設計之優化
Parametric Study and Optimum Design of Gasifier

計畫編號：1032001INER027

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：陳柏壯

報告日期：103 年 11 月 28 日

摘要

本研究以計算流體力學軟體 Ansys FLUENT 為基礎，建立粉煤於流體化床內之燃燒與氣化行為解析之化學反應多相流數值模擬分析模式。分析模型之物理模式包括： $k-\varepsilon$ 紊流模式、熱輻射模型、化學反應模型以及顆粒流分子運動模型。目前已可針對流體化床內部現象進行可視化流場解析，並探討流體化床中氣泡之產生及其對流場之影響。結果顯示，氣泡會先於壁面附近產生，挾帶著粒子逐漸向中心靠攏並向上移動。氣泡破裂後，粒子將向下撞擊床沙，在床沙頂部形成震盪狀的幾何形狀。而床沙頂部中心處高度變化較為平緩。

化學反應機制部分，採用 Finite rate/Eddy Dissipation 模擬氣化爐內氣化反應，結果顯示異相反應發生在氣化爐下方，其中氧氣濃度高的區域，燃燒反應為優勢反應，當氧氣消耗殆盡後， $C(s)-CO_2$ 與 $C(s)-H_2O$ 始成為優勢反應。

Abstract

In the present study, a multi-phase chemical-reacting flow simulation model has been developed for combustion and gasification of pulverized coal in a fluidized-bed gasifier based upon the commercial CFD software, “Ansys FLUENT”. The simulation model includes the physical models such as: k- ϵ turbulent model, thermal radiative model, chemical reaction, and the kinetic theory of granular flow. The visualized flow field of a fluidized bed has been successfully predicted with the influence of the bubbles generated in fluidized bed on the flow field being investigated. The results show that bubbles which are first generated near the wall carry particles toward the center of the reactor. Then, bubbles rise and grow in size. The bubbles burst due to drag between solid and gas. The particles then splash down and make the bed surface near the bed wall fluctuated. However, the bed surface maintains relatively flat at the center.

For Chemical reaction mechanism, homogeneous and heterogeneous reactions were determined by the Finite rate and Eddy Dissipation. The results show that heterogeneous reactions take place in the lower region of the reactor. When concentration of oxygen is high, the combustion reaction is dominant. After the exhaustion of oxygen, the C(s)-CO₂ and C(s)-H₂O processes become important reaction.

目錄

摘要	I
Abstract	II
目錄	III
圖目錄	V
表目錄	VI
壹、計畫緣起與目的	1
一、研究背景	1
二、氣化方式與原理	4
貳、文獻回顧	12
參、研究方法與過程	20
一、守恆方程與計算模型	20
(一)質量守恆：	21
(二)動量守恆：	21
(三)顆粒溫度	23
(四)固體振盪動能之守恆方程式(Conservation of Solids Fluctuating Energy)：	23
(五)固-氣相間之阻力交換係數	24
(六)紊流模式	25
(七)能量守恆：	26
(八)熱輻射(Radiative Transfer Equation)：	27

(九)成份質量守恆方程式：	27
(十)化學反應機制	28
二、FLUENT 中之計算模型與選擇	29
三、煤粒之相關訊息	30
四、氣化爐-幾何尺寸與邊界條件	31
肆、結果討論	34
一、流場現象	34
二、異相反應速率	39
伍、結論	42
陸、參考文獻	43

圖目錄

圖 1-1 氣化複循環發電系統【9】	3
圖 1-2 單煤粒受熱分解示意圖【15】	5
圖 1-3 三種典型氣化爐示意圖【13】	6
圖 1-4、流體化原理圖	9
圖 3-1、實驗之氣化爐示意圖【43】	32
圖 4-1、 $X=0$ 切面之各時間之固相體積分率圖	35
圖 4-2、 $Y=0$ 切面之各時間之固相體積分率圖	35
圖 4-3、 $x=0$ 切面之固相速度向量圖	36
圖 4-4、 $x=0$ 切面之氣相軸向速度分布	37
圖 4-5、 $x=0$ 切面之固相軸向速度分布	37
圖 4-6、 $x=0$ 切面之氣相軸向速度分布【45】	38
圖 4-7、 $x=0$ 切面之固相軸向速度分布【45】	38
圖 4-8、 O_2 分佈圖	39
圖 4-9、 $C(s)$ 分佈圖	39
圖 4-10、 $C(s)$ 相關之反應速率	40
圖 4-11、 $C(s)$ 相關之反應速率【45】	41

表目錄

表 3-1. 計算模型	30
表 3-2. 固相(第二相)之計算模型	30
表 3-3. 相之間交互作用	30
表 3-4. 煤成份之元素分析與工業分析【44】	31
表 3-5 操作條件【44】	33
表 3-7 三維網格入口條件	33

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。近日價格雖稍有下滑，然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問題。根據調查，全球化石能源蘊藏量中，煤炭佔總蘊藏量之72%，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)粉煤燃燒效率不斷提高；(4)可作為化工原料，用途廣泛【4, 5】。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2013年的30.15%，年成長率約為6.61%【6】。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。因此抑制全球暖化現象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燃燒技術(Clean Coal-Combustion Technology)之發展，以符合環保與經濟並重之雙重要求。

所謂淨煤燃燒技術，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，進而完成煤炭高效與淨潔使用之目標。較典型之淨煤燃燒技術包括：加壓循環式流體化床燃燒(Pressurized Circulating Fluidized Bed Combustion, PCFBC)、超臨界粉煤鍋爐(Super-critical Pulverized Coal Boiler, SCPCB)發電、整合型氣化複循環(Integrated Gasification Combined Cycle, IGCC)發電、整合型氣化複循環燃料電池(Integrated Gasification Fuel Cell, IGFC)等技術。其中整合型氣化複循環發電系統 IGCC 之概念圖如圖 1-1 所示，而氣化燃氣複循環燃料電池 IGFC 系統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%左右【7, 8】。

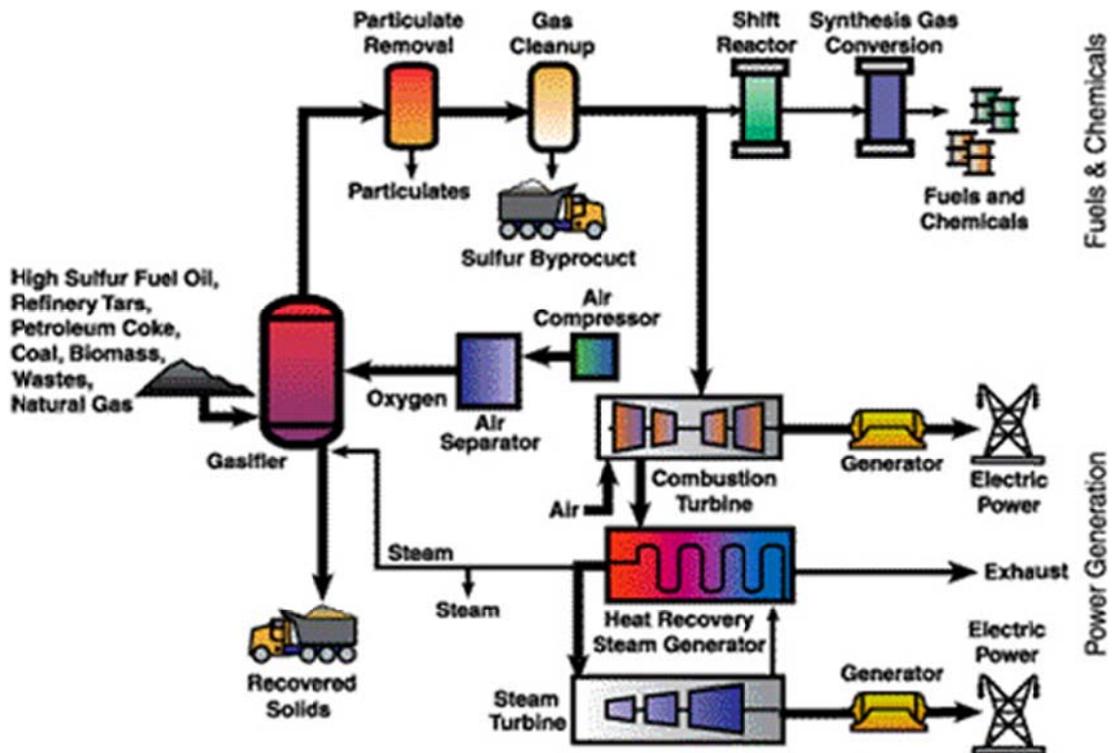


圖 1-1 氣化複循環發電系統【9】

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 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【10-11】。

就國內目前的電廠狀況而言，由於核能電廠的發展已趨飽和，電力的主要來源仍以火力發電為主，其中燃煤發電於 2012 年佔 49.01%，至 2013 年，更提高達到 53.7%。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，在煤炭氣化發電及其多元應用的評估與設立計畫，實為刻不容緩。

二、氣化方式與原理

氣化是一種非催化之不完全氧化反應【12】，亦即利用缺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【13】。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 CO_2 及 H_2O 。而煤炭氣化則是讓煤炭進行吸熱反應，使煤炭熱解成可燃氣，其中典型之生成氣有一氧化碳(CO)、氫氣(H_2)、甲烷(CH_4)等，一般稱之為合成氣。然而現今大多數之製成產物多為 CO 及 H_2 【14】。判斷氣化結果之理想與否，通常以碳轉換率 (Carbon 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。碳轉換率愈高，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）及焦炭氧化（Char Oxidation）。在氣化過程中，由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。單一煤粒受熱分解之示意圖，如圖 1-2 所示。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，會與 CO 、 O_2 、 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，即可取得所需之氣化合成氣。

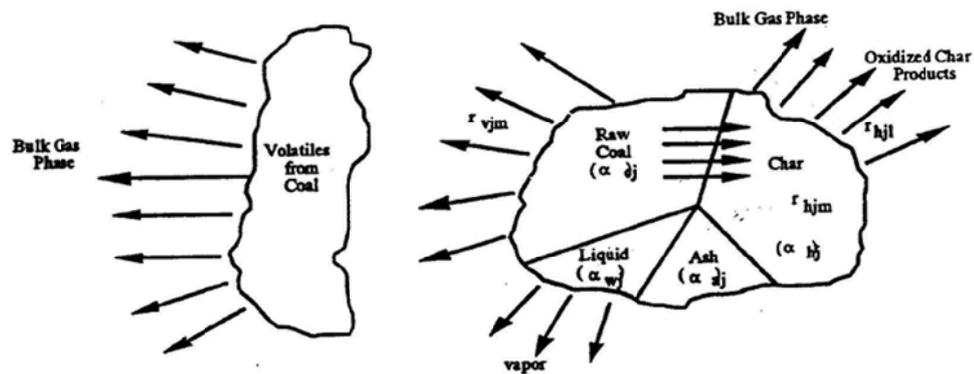


圖 1-2 單煤粒受熱分解示意圖【15】

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。為了滿足對氣化合成氣產量之需求，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【16】，如圖 1-3 所示。

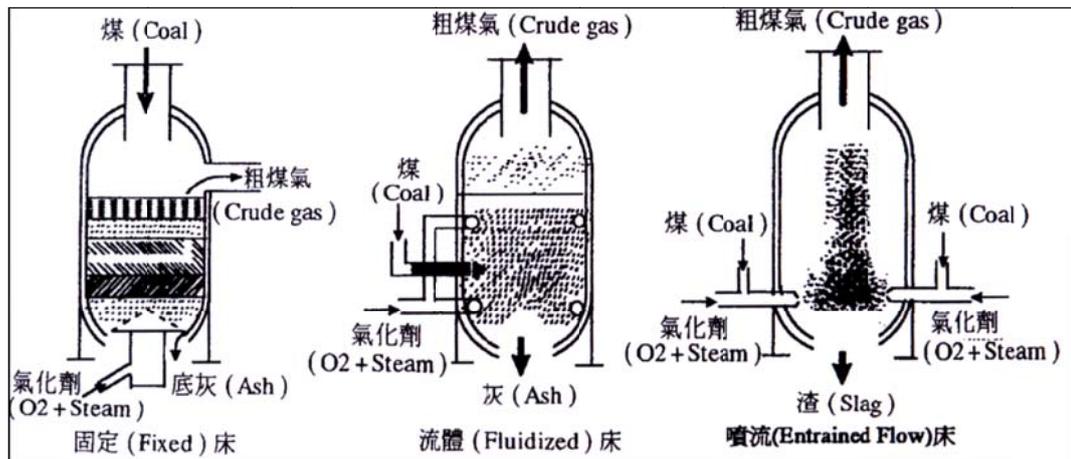


圖 1-3 三種典型氣化爐示意圖【13】

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 1-3 所示，燃料由固定床式氣化爐上方進料孔進入，而由下方供應氣化劑。當流速低時，氣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氣化劑，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。氣化區則為煤炭、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，讓煤粒像流體一樣有自由流動之特質。其特點為煤粒與氣化劑接觸面積大，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，氣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，讓燃料及氣化劑能在進入反應器時達到最佳之預混狀態。

相較於固定床式氣化爐，流體化床氣化爐具有高效率、高熱傳率、低燃燒溫度、低污染物排放及燃料限制較低之優點【17】。流體化床中的氣體與燃料粒子化學反應屬於多相流反應，包括氣體間的同相反應 (Homogeneous Reaction) 以及氣體與燃料粒子間的異相反應 (Heterogeneous Reaction)。其燃燒與氣化反應中，反應物方面則包含燃料、惰性粒子，氣化劑方面則是空氣或氧氣及水蒸氣等。在流體化床氣化爐中，進入床體的氣體會以氣泡的形式快速向上通過床體並帶動床體固體粒子均勻攪拌混合。攪拌混合的過程中，流體與固體粒子彼此相互交換熱量而達到高熱傳率之效果。因此，使得床體溫度趨向均勻分布。而且，由於床體中固體顆粒熱容量較大，導致床體溫度不易劇烈變化。因此，可使燃燒氣化行為穩定，容易進行連續穩定之操作。

流體化床氣化爐可使用多種型態之燃料，具有高度之燃料選擇彈性。除了使用傳統化石燃料時表現優異外，對於低等級之劣質煤炭、含砂石之油頁岩或一般都市固體廢棄物，都可達到很高的氣化效率。此外，液態或氣態之燃料同樣也能在流體化床氣化爐中使用。流體化床氣化爐具有較低之燃燒溫度。一般而言，其燃燒溫度大約為攝氏 850 度，比一般煤燃燒爐低。因此，氮氧化物 (NO_x) 之排放濃度較低，而硫氧化物 (SO_x) 可藉由爐內添加石灰石 (CaCO₃) 吸收。因此，流

體化床氣化爐具有低汙染物排放之特性。

流體化床之原理如圖 1-4 所示【18-19】。當均勻分布之氣體以低速向上通過由固體顆粒所組成之緻密床時，固體顆粒未受到干擾。然而，當氣體速度增加達到最小流體化速度時，一些顆粒開始懸浮於空氣流中，固體顆粒層就會呈現類似流體的行為，此現象稱之為「流體化」。而具有流體行為的固體顆粒層就稱為「流體化床」。當氣體速度更加提升時，氣泡、旺盛的紊流便會形成，流體化床中的固體顆粒開始表現出類似液體沸騰的現象，此時稱其為「氣泡式流體化床」。若再將氣體速度提升至挾帶速度，氣泡開始消失而固體顆粒開始被氣流向上挾帶出床體，未完全燃燒的顆粒藉由旋風分離器回收，稱此裝置為「循環式流體化床」。

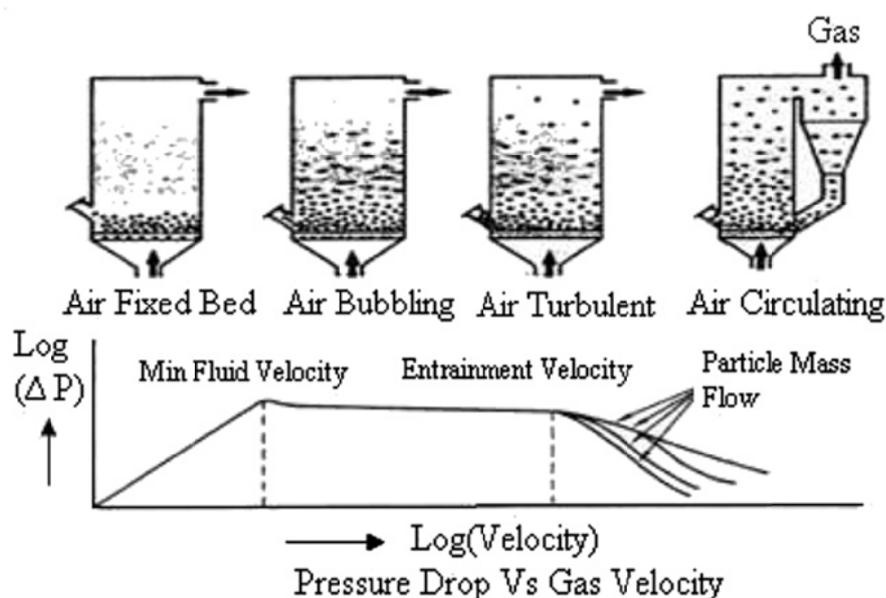


圖 1-4、流體化原理圖

由流動形式及構造上的不同，可將流體化床分為四類，分別為：氣泡式流體化床(Bubbling Fluidized Bed)、循環式流體化床(Circulating Fluidized Bed)、加壓式流體化床(Pressurized Fluidized Bed)以及雙循環式流體化床(Dual Fluidized Bed)【17】。氣泡式流體化床是最早發展之形式，其操作壓力為常壓，且其氣體速度保持在挾帶速度以下操作。由於氣體速度小於挾帶速度，使得流體化床燃燒爐中可明顯分為下方的流體化床區及床表面以上的乾舷區兩部分。當氣化爐操作時，固體燃料利用重力的特性投入流體化床中進行反應，會在床內因高溫分解成氣態揮發物及固態之固定碳。固定碳的粒子會留在床內進行碳與氧氣之異相（固體—氣體）氧化反應，而氣態之揮發物會隨著向上的氣流到達上方的乾舷區進行勻相（氣體—氣體）之燃燒反應。燃燒所放出的熱能可藉由設置在爐內的熱傳管產生蒸氣加以回收。由於氣泡式流體化床在燃料之選擇上十分彈性，並可處理不易燃燒之低級燃料或成分複雜之廢棄物。因此，常應用於廢棄物焚化，燃燒生質燃料及多種燃料混合燃燒。

在循環式流體化床中，氣體速度大於挾帶速度，故部分尚未完全燃燒之固定碳粒子會被高速氣流挾帶離開。粒子隨著氣流一起向上流動之過程中，同時會燃燒放熱。若在上升過程中不足以完全燃燒，則

未燃盡之碳粒子會被煙氣出口處之旋風分離器捕捉下來，再集中落回燃燒爐內，使得固體粒子在系統中不斷循環使用。循環式流體化床反應爐之效率非常高，所以這項技術是目前備受矚目之淨煤技術之一。加壓式流體化床的概念是增加氣體的壓力，使空氣的黏度及密度增加，如此可以降低流體化所需要的氣體速度。與相同尺寸常壓下之流體化床反應爐相比，加壓式流體化床可提高燃料之處理量，但目前仍處於發展階段。雙流體化床之概念則是使負責燃燒之區域(Riser)與負責氣化之區域(Gasification)隔離。因此，能夠避免焦炭直接與揮發物接觸。Koichi【20】等人便曾建立燃燒器與氣化爐隔離之雙循環式流體化床，並與未隔離之對照組比對，結果發現燃燒與氣化隔離之雙循環式流體化床有較高之碳轉化率。

貳、文獻回顧

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 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。Smoot 【23】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：

1. 反應物紊性混合 (Turbulent Mixing)
2. 煤粒紊性散佈 (Turbulent Dispersion)
3. 煤粒熱對流加熱 (Convective Coal Particle Heatup)
4. 煤粒熱輻射加熱 (Radiative Coal Particle Heatup)
5. 煤炭去揮發化作用 (Devolatilization)
6. 生成揮發物之氣體反應 (Gaseous Reaction of Volatiles)
7. 焦炭中之異相反應 (Heterogeneous Reaction of Char)

8. 煤渣 (Ash/Slag) 之形成與殘留 (Residue)

Smoot 【23】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。Neogi 等人【24】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 CO_2 、 H_2O 與 CO 、 H_2O 之轉換反應。由於使用之煤粒粒徑很小，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 H_2 為主。

工研院及台電電研所提出之報告中【25】，曾分析了各種煤氣化反

應器之優劣性，並針對溫度與壓力對氣化的影響做了定性之分析。當溫度提高或壓力降低時，CO 及 H₂ 之量會提高，而 CH₄ 則會減少。由於生成產物中 CH₄ 僅佔少數，故一般皆以提高 CO、H₂ 之量為目標。Kim 等人【26】探討了利用流體化床型 (Fluidized-Bed) 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。

在加壓情況下反應之研究方面，Liu 等人【27】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。Wall 等人【28】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。

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【29】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【30】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。

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【31】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。Grabner 等人【32】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，進料量預定為 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【33】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【34】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- ϵ 跟 RSM 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(Cheical 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。

周【35】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【36】以簡化成份後之氣化燃氣(CO 、 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【37】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 $O_2/Coal$ 、 $H_2O/Coal$ 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【38】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，

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。

由於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，並可應用於高效率複循環發電系統 IGCC 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。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。尤其是針對相當複雜之流體化床氣化爐之燃燒及氣化現象，需要建立一模擬分析技術，以探討研究粉煤於流體化床之多相流及複雜之燃燒與氣化現象。因此，本研究將針對粉煤於流體化床氣化爐之燃燒與氣化建立一化學反應多相流數值模擬分析模式，以期能提供流體化床氣化爐設計及建造所需之參數資料。

參、研究方法與過程

在氣化爐研究上，常用歐拉-歐拉(Eulerian-Eulerian)及歐拉-拉格朗吉(Eulerian-Lagrangian)方法研究多相流問題。歐拉-拉格朗吉方法將氣相視為互相滲透之連續體(Inter-penetrating Continua)，並用 Navier-Stokes Equations 求解；固相則視為離散相，而其物理現象則以追蹤並觀察大量粒子行為而獲得。歐拉-歐拉方法則是將氣相及固相均視為連續體，守恆方程式將會分別使用於氣相及固相中求解，且由於一相所佔的體積無法再被另外一相佔據，故引入相體積分率的概念，各相之體積分率之合等於 1。由於流體化床氣化爐中粒子數量極多，若使用歐拉-拉格朗吉方法將需要大量之計算資源。因此，本研究將以泛用型商用軟體 FLUENT，利用歐拉-歐拉方法針對流體化床氣化爐之多相流建立分析模式。並使用其中的 Eulerian Model 處理流體化床之固相流場，不同相流場將被視為互相滲透的連續流體來處理。值得一提的是氣相以 k- ϵ 紊流模型處理，固相視為顆粒流利用顆粒流分子運動論加以描述(the kinetic theory of granular flow)。

一、守恆方程與計算模型

首先在氣相(g)與固相(s)方面將包含質量、動量、能量以及成份守

恆方程式【39】

(一)質量守恆：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{V}_g) = \dot{m}_{sg} \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{V}_s) = -\dot{m}_{sg} \quad (2)$$

氣相密度 (理想氣體)：

$$\rho_g = \frac{P}{RT \sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{W_i}} \quad (3)$$

其中， α ：體積分數

V ：氣相(固相)速度

ρ ：密度

\dot{m}_{sg} ：從固相到氣相之質量

(二)動量守恆：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \vec{V}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{V}_g \vec{V}_g) = -\alpha_g \nabla P_g + \nabla \alpha_g \cdot \tau_g + \alpha_g \rho_g g + \beta(\vec{V}_s - \vec{V}_g) \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \vec{V}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{V}_s \vec{V}_s) = -\alpha_s \nabla P_s + \nabla \alpha_s \cdot \tau_s + \alpha_s \rho_s g - \beta(\vec{V}_s - \vec{V}_g) \quad (5)$$

其中， τ ：應力張量

β ：相間之交換係數

∇P_s ：為顆粒撞擊所造成之固相壓力

λ_s ：體積粘度

μ_s ：固體黏性

$$\tau_g = \alpha_g \mu_g [\nabla \bar{V}_g + (\nabla \bar{V}_g)^T] - \frac{2}{3} \alpha_g \mu_g (\nabla \bar{V}_g) \quad (6)$$

$$\tau_s = \alpha_s \mu_s [\nabla \bar{V}_s + (\nabla \bar{V}_s)^T] - \frac{2}{3} \alpha_s \mu_s (\nabla \bar{V}_s) + \alpha_s \lambda_s \cdot \nabla \bar{V}_s \quad (7)$$

其中， λ_s 【40】、 μ_s 可由下式獲得：

$$\lambda_s = \frac{4}{5} \alpha_s \rho_s d_s g_o (1-e) \left(\frac{\Theta}{\pi}\right)^{0.5} \quad (8)$$

$$\mu_s = \frac{\mu_{s, dll}}{(1+e)g_o} \left[1 + \frac{4}{5} (1+e)g_o \alpha_s\right]^2 + \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_s d_s (1+e)g_o \left(\frac{\Theta}{\pi}\right)^{0.5} \quad (9)$$

λ_s ：體積黏性

Θ ：顆粒溫度 (m/s^2)

μ_s ：固體剪切黏性

$\mu_{s, dll}$ ：稀釋黏性 (Dilute viscosity)

$$= \frac{5\sqrt{\pi}}{96} \rho_s d_s \Theta^{0.5}$$

g_o : 徑向分布函數

$$= \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s, \max}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1} \quad (10)$$

(三) 顆粒溫度

考慮粒子溫度 (Granular Temperature) 來測量粒子的波動動能 (Fluctuating Kinetic Energy)，定義顆粒溫度 Θ_s (Granular Temperature) :

$$\Theta_s = \frac{1}{3} \overline{V_s'^2} \quad (11)$$

其中， $\overline{V_s'}$ 為固體振盪速度，而瞬時速度以平均速度 (Mean Velocity) 以及振盪速度 (Fluctuation Velocity) 表示： $\overline{V_s} = \overline{V_s} + \overline{V_s'}$

(四) 固體振盪動能之守恆方程式 (Conservation of Solids

Fluctuating Energy) :

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \Theta) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \overline{V_s} \cdot \Theta) \right] = - (P_s I + \alpha_s \tau_s) : \nabla \overline{V_s} + \nabla \cdot k_s \nabla \Theta - \gamma \quad (12)$$

其中， $(P_s I + \alpha_s \tau_s) : \nabla \overline{V_s}$: 剪應力所作之功造成振盪能量之增加

$\nabla \cdot k_s \nabla \Theta$: 擴散之能量 (k_s 為擴散係數)

γ ：非彈性碰撞所造成的振盪能量損失

$$k_s = \frac{k_{dill}}{(1+e)g_o} \left[1 + \frac{6}{5}(1+e)g_o\alpha_s \right]^2 + 2\alpha_s^2 \rho_s d_s \left(\frac{\Theta}{\pi} \right)^{0.5} \quad (13)$$

$$k_{dill} = \frac{75\sqrt{\pi}}{384} \rho_s d_s \left(\frac{\Theta}{\pi} \right)^{0.5} \quad (14)$$

$$\gamma = 3(1-e^2)\alpha_s \rho_s g_o \Theta \left[\frac{4}{d_s} \left(\frac{\Theta}{\pi} \right)^{0.5} - \nabla \cdot \vec{V}_s \right] \quad (15)$$

(五)固-氣相間之阻力交換係數

在動量交換中，氣相與固相間之交換係數(β)也需要考慮【41】，可依 α 之大小決定。

$\alpha \geq 0.8$ 時：

$$\beta = \frac{3}{4} C_d \frac{\alpha_s \rho_s |\vec{V}_g - \vec{V}_s|}{d_s} \alpha_s^{-2.65} \quad (16)$$

$\alpha < 0.8$ 時：

$$\beta = 150 \frac{(1-\alpha_g)\mu_g}{\alpha_s d_s^2} + 1.75 \frac{\rho_g \alpha_s |\vec{V}_g - \vec{V}_s|}{d_s} \quad (17)$$

其中：

$$\text{Re}_s = \frac{\alpha_s \rho_s d_s |\vec{V}_g - \vec{V}_s|}{\mu_g} \quad (18)$$

當 $Re_s < 1000$ 時：

$$C_d = \frac{24}{Re_s} (1 + 0.15 Re_s^{0.687}) \quad (19)$$

當 $Re_s \geq 1000$ 時：

$$C_d = 0.44 \quad (20)$$

(六) 紊流模式

另外紊流動能 k 與其消散率 ε 之傳輸方程式(Mixture Turbulence

Model)：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m k) + \nabla \cdot (\rho_m \overline{V_m k}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{t,m}}{\sigma_k} \nabla k \right) + G_{k,m} - \rho_m \varepsilon \quad (21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \varepsilon) + \nabla \cdot (\rho_m \overline{V_m \varepsilon}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{t,m}}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{1\varepsilon} G_{k,m} - C_{2\varepsilon} \rho_m \varepsilon) \quad (22)$$

式(21)與(22)中之 $\overline{V_m}$ 、 ρ_m 項分別混合速度、混合密度，可以下式

求之：

$$\rho_m = \sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i \quad (23)$$

$$\overline{V_m} = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i \overline{V}_i}{\sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i} \quad (24)$$

而紊流黏度 $\mu_{t,m}$ 為：

$$\mu_{t,m} = \rho_m C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (25)$$

紊流動能 $G_{k,m}$ 為：

$$G_{k,m} = \mu_{t,m} (\nabla \bar{V}_m + (\nabla \bar{V}_m)^T) : \nabla \bar{V}_m \quad (26)$$

而紊流模式中所使用之相關經驗常數如下【42】：

$$C_\mu = 0.09$$

$$C_{1\varepsilon} = 1.44$$

$$C_{2\varepsilon} = 1.92$$

$$\sigma_k = 1.0$$

$$\sigma_\varepsilon = 1.3$$

(七)能量守恆：

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g H_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \bar{V}_g H_g) = \nabla \cdot (\lambda_g \nabla T_g) + Q_{gs} \quad (27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s H_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \bar{V}_s H_s) = \nabla \cdot (\lambda_s \nabla T_s) + Q_{sg} \quad (28)$$

其中： H ：焓

$$Q_{gs} = -Q_{sg}$$

而 Q_{sg} 可由下式取得：

$$Q_{sg} = h_{sg}(T_s - T_g) \quad (29)$$

$$h_{sg} = \frac{6k_g \alpha_s \alpha_g Nu_s}{d_p^2} \quad (30)$$

(八)熱輻射(Radiative Transfer Equation)：

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} + (a + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' \quad (31)$$

而在眾多熱輻射模式中，將選擇最常用之 P-1 Model。

(九)成份質量守恆方程式：

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho^q \alpha^q Y_i^q) + \nabla \cdot (\alpha^q \rho^q \vec{V}^q Y_i^q) = -\nabla \cdot (\alpha^q \vec{J}_i^q) + \alpha^q R_i^q + \sum_{p=1}^n (m_{pq,i} - m_{qp,i}) + R \quad (32)$$

其中： R_i^q 為 q 相中 i 成份經由化學反應之生成率

$m_{q,p,i}$ 表示方向由 q 相到 p 相，成分 j 與 i 間之質量轉移

R 表示異相反應之反應速率

α^q 表示 q 相之體積分率

Y_i^q 表示 q 相 i 成分之質量分率

$$\vec{J}_i = -(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t}) \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (33)$$

其中 $D_{i,m}$ 為成分 i 之擴散係數

為熱力擴散係數

μ_t 為紊流黏滯係數

S_{ct} 為施密特數 (Schmidt Number)

(十)化學反應機制

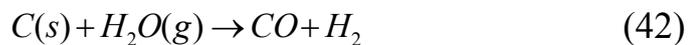
將使用 FREDM(Finite-Rate/Eddy Dissipation Model)模型對紊流燃燒及化學反應現象進行處理。在 FREDM 模型中，整體反應速率會被紊流混合所控制，且取決於阿瑞尼斯速率及紊流混合速率兩者之中，速率較小者為主導反應式之進行。故在此特點下，利用大尺度混合時間尺度去控制化學反應速率，故流體可由流場之紊流強度和環境溫度達到適當條件即可產生化學反應機制。此外，組分部分，氣相包含 O_2 、 CO 、 CO_2 、 H_2O 、 N_2 、 H_2 ；固相包含 Char、 $CaCO_3$ (床沙)。

其中，反應式包含八條，五個同相反應及三個異相反應【45】，且吾人假設煤炭於入口處很快便完成裂解反應，因此化學反應中不考慮去揮發反應，並直接由邊界條件提供裂解完畢之各成分，藉此簡化系統分析模型。氣態之可燃氣體將進行氣相(同相)之氧化反應如下：





在式(34)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(39)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：



二、FLUENT 中之計算模型與選擇

依據上述之方程式，吾人於 FLUENT 中設定計算模型，整理如表 3-1；固相(第二相)之計算模型如表 3-2；相之間交互作用(phase interaction)如表 3-3。

表 3-1. 計算模型

多相流模型	Eulerian Model
紊流模型	k-epsilon(dispersed)
輻射模型	P1
化學反應	FREDM

表 3-2. 固相(第二相)之計算模型

顆粒黏性(granular viscosity)	Gidaspow
體積粘度(bulk viscosity)	Lun-et-al
顆粒傳導係數(granular conductivity)	Gidaspow
固體壓力(solid pressure)	Lun-et-al
徑向分布(radial distribution)	Lun-et-al

表 3-3. 相之間交互作用

阻力係數(drag coefficient)	Gidaspow
熱傳遞係數(heat transfer coefficient)	Gunn

三、煤粒之相關訊息

本研究採用之煤種為哥倫比亞煤，其熱值為 29695 kCal/kg，其元

素分析與工業分析如表 3-4 所示。

表 3-4. 煤成份之元素分析與工業分析【44】

元素分析	Wt%
C	75.3
H	5.4
O	1.8
N	15.6
S	0.4
工業分析(DAF)	Wt%
Volatile ^a	41.8
Fixed Carbon	54.1
Moisture	2.6
Ash	1.5

四、氣化爐-幾何尺寸與邊界條件

本研究所模擬之幾何外型乃是參考 Ocampo 等人所實驗之流體化床【44】。空氣與水於下方注入口引進，煤則由側管注入，氣化爐幾何形狀為一圓柱體，全長 200 公分，爐內直徑 22 公分，而側管直徑長 4 公分，其幾何形狀如圖一所示。

本研究所參考之流體化床氣化爐，其反應爐全長 200 公分，爐內直徑 22 公分；側管直徑 6 公分，側管長 6 公分，其幾何形狀如圖 3-1 所示【43】，吾人根據幾何形狀建立六面體結構網格，以期能良好的控制網格質量，所建之網格如圖 3-2 及圖 3-3。而操作條件如表 3-5【44】。邊界條件類型之選擇如表 3-6，而入口條件如表 3-7。

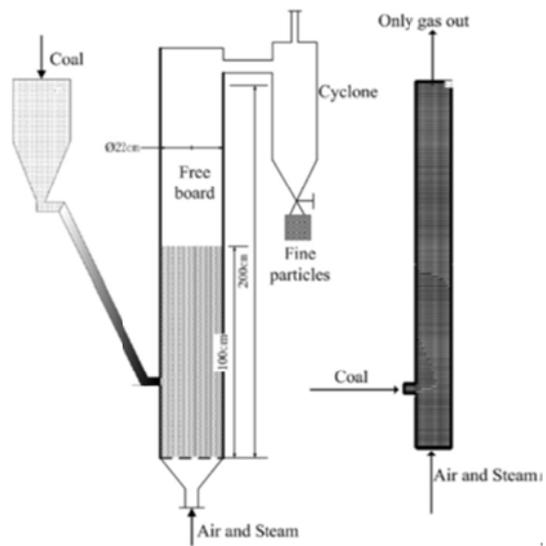


圖 3-1、實驗之氣化爐示意圖【43】

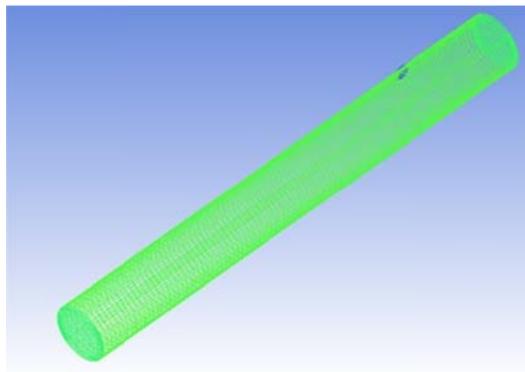
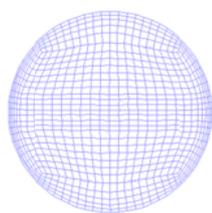
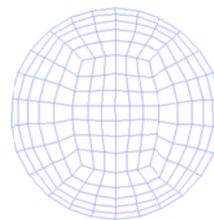


圖 3-2、流體化床氣化爐網格



(a)



(b)

圖 3-3、(a) air and steam inlet 切面圖 ;(b) coal inlet 切面圖

表 3-5 操作條件【44】

Coal (kg/h)	8.0
Air(kg/h)	21.9
Steam(kg/h)	4.7
Temperature of air and steam inlet(K)	695

表 3-6 邊界條件類型

air and steam inlet	mass flow inlet
coal inlet	mass flow inlet
outlet	pressure outlet
wall	no-slip condition、zero heat flux

表 3-7 三維網格入口條件

			species
Air and steam inlet (695K)	Gas phase(kg/s)	0.007361	64.4604%N ₂ 、18.1811%O ₂ 、17.3585% H ₂ O
	Solid phase(kg/s)	0	0
coal inlet (300K)	Gas phase(kg/s)	0.00102	91.0675%Vol、5.6645%H ₂ O、3.268%ash
	Solid phase(kg/s)	0.001424	84.3994%Char、15.6006%CaCO ₃

肆、結果討論

一、流場現象

流場現象部分，本研究目前已成功發展流體化床流場之可視化，能觀察流體化床中氣泡的產生與對流場的影響。

本研究結果顯示，氣泡會於壁面附近產生，挾帶著粒子逐漸向中心靠攏並向上移動。氣泡破裂後，粒子將向下撞擊床沙，在床沙頂部形成震盪狀的幾何形狀。而床沙頂部中心處高度變化較為平緩。各階段流場之發展說明如下：

氣泡一開始由壁面附近產生，並在移動的過程中挾帶固體粒子朝床沙表面移動，最終氣泡會因為撞擊床沙表面而破裂，如圖 4-1 (a)(b) 及圖 4-2 (a)(b)，而粒子重力影響產生向下的固相速度，如圖 4-3 (a)(b)。氣泡於床沙上層表面破裂時，於床沙底部位置新生的氣泡向中心軸匯聚圖 4-1 (c)(d)，而固相速度再次因為氣泡破裂產生向下之速度向量，如圖 4-3。此後，上述之流場現象循環發生，最後 $x=0$ 切面之床沙頂部高度變化趨近平緩，如圖 4-1 (e)(f)。而由 $y=0$ 之切面觀之(圖 4-3)，可發現床沙頂部兩端處高度變化較中心劇烈較。若與 $x=0$ 之切面相互比較，可知流場中心處之沙床高度受氣泡影響較小。

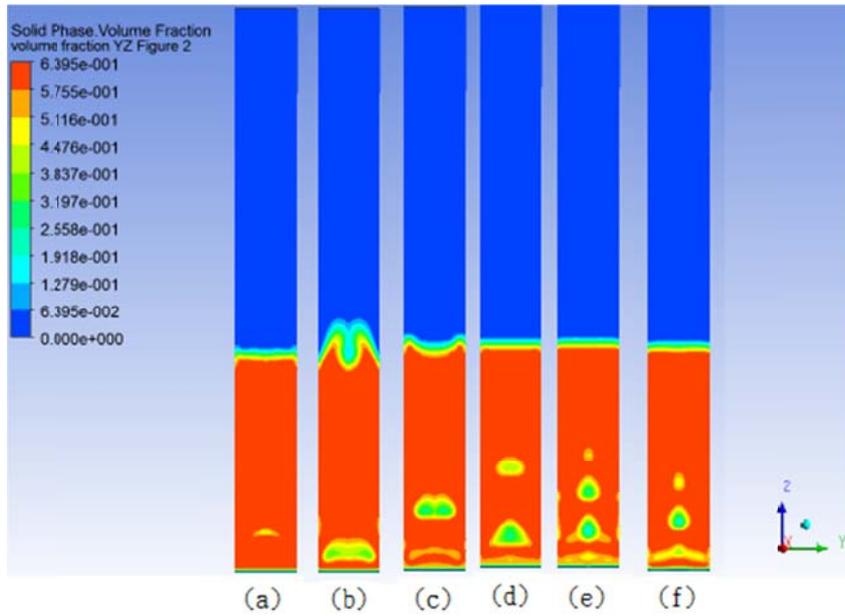


圖 4-1、 $X=0$ 切面之各時間之固相體積分率圖
(a)0.4s;(b)0.6s;(c)0.8s;(d)1.0s;(e)2.0s;(f)4.0s

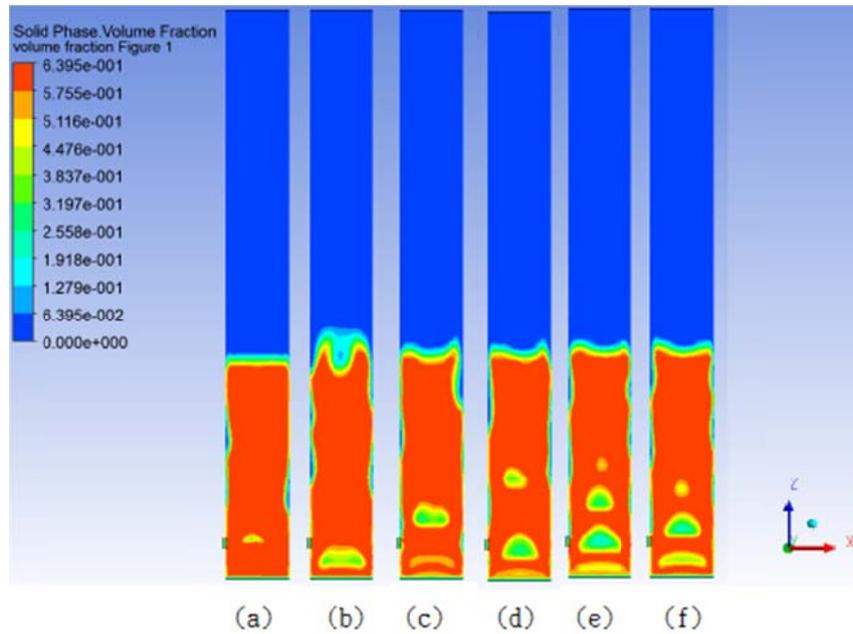


圖 4-2、 $y=0$ 切面之各時間之固相體積分率圖
(a)0.4s;(b)0.6s;(c)0.8s;(d)1.0s;(e)2.0s;(f)4.0s

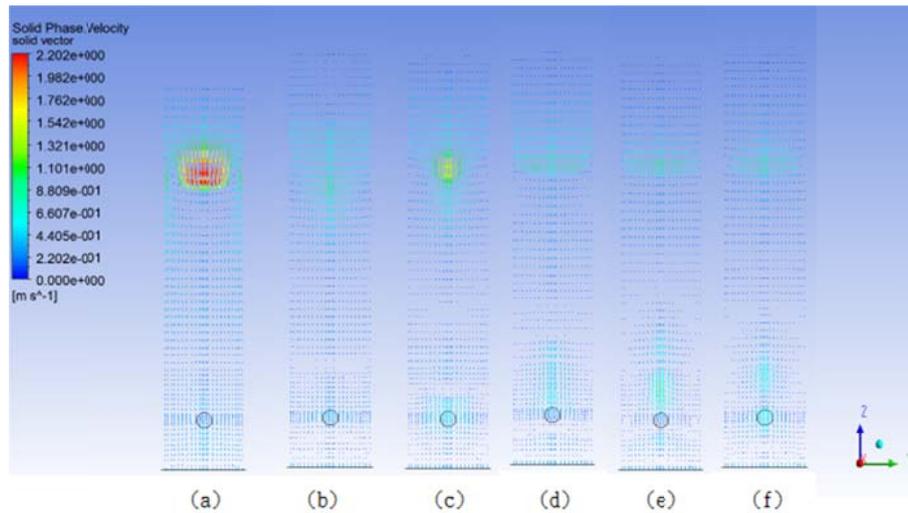


圖 4-3、 $x=0$ 切面之固相速度向量圖
 (a)0.4s;(b)0.6s;(c)0.8s;(d)1.0s;(e)2.0s;(f)4.0 s

圖 4-4 與圖 4-5 分別描述氣相與固相在 $X=0$ 切面上之軸向速度分布。在高度較低之區域可觀察到不論氣象或固相速度變化較大，乃是因為氣泡形成之故。而其中在中心軸部分($r/R=0$)，由於氣泡向上的過程中同時朝中心軸匯聚，故中心軸速度較高。於高度近一公尺處，被氣體挾帶之固體顆粒因氣泡破裂而速度陡降(受重力影響)，至高度約 1.3~1.4 公尺處已幾乎無固體顆粒出現，故固體速度在高度 1.4 公尺以上為 0。

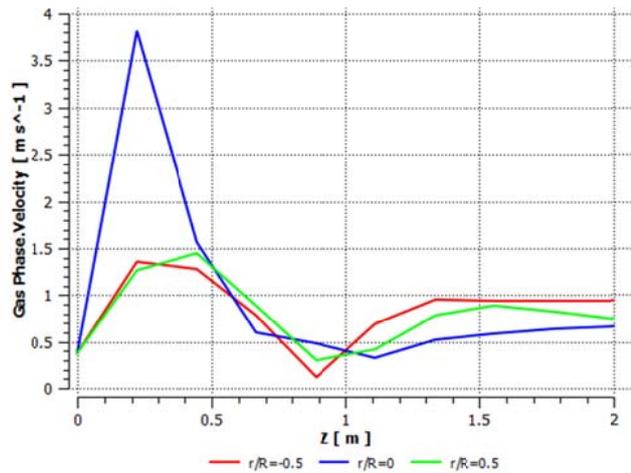


圖 4-4、x=0 切面之氣相軸向速度分布

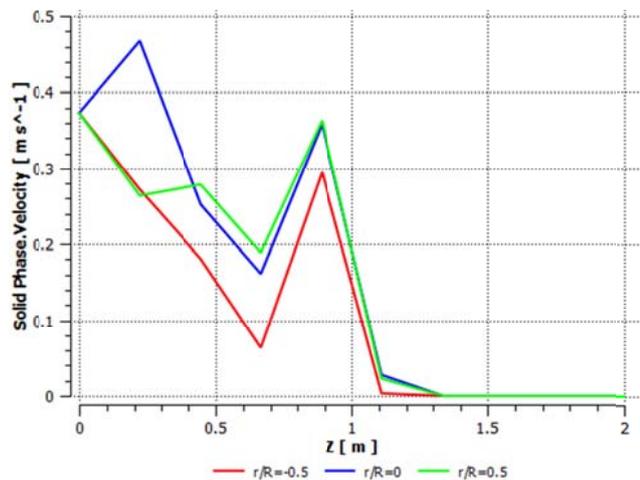


圖 4-5、x=0 切面之固相軸向速度分布

將兩相軸相速度分佈結果與文獻之比對，如圖 4-5 與圖 4-6，顯示兩相之入出口速度部分相當接近，惟低高度之速度分布略微不同，推測為文獻氣相入口速度較慢，而研究之入口速度較快所造成的現象。

固相速度分佈部分，研究結果顯示固體粒子所達之最高高度約為 1.3~1.5 公尺處後，而文獻則是 1.4~1.5 公尺。

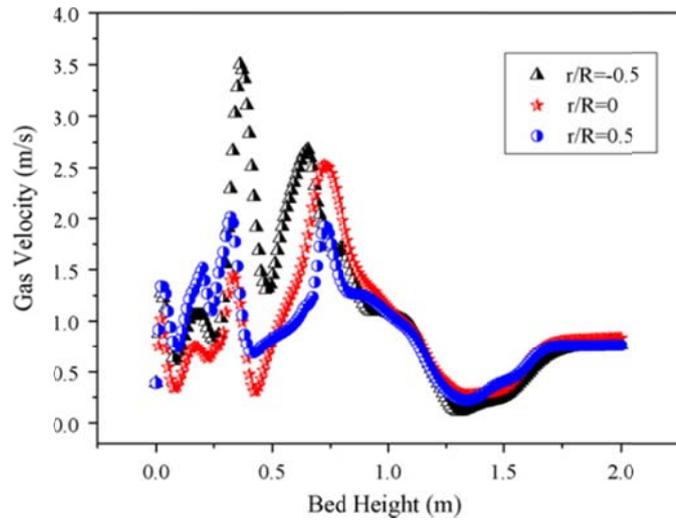


圖 4-6、 $x=0$ 切面之氣相軸向速度分布【45】

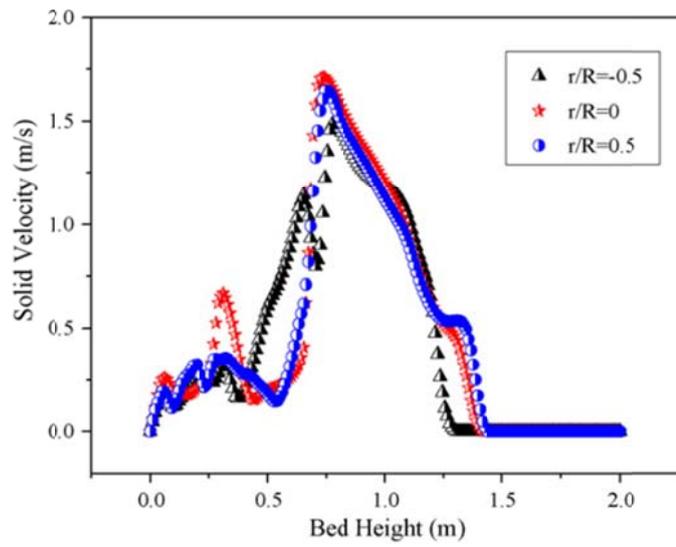


圖 4-7、 $x=0$ 切面之固相軸向速度分布【45】

二、異相反應速率

化學反應部分，反應速率以阿瑞尼士反應速率式表示。圖 4-8 及圖 4-9 分別表示氧氣及二氧化碳在軸向($X=0$ 之切面上)之分布情形，圖 4-10 表示 $C(s)$ 相關之反應速率。

由先前流場分析得知固體粒子有其高度限制，推測異相反應發生之區域位於氣化爐下方之區域，此現象可由觀察 $C(s)$ 之分布及反應速率驗證，如圖 4-9 及圖 4-10，異相反應發生之位置位於氣化爐下半部。

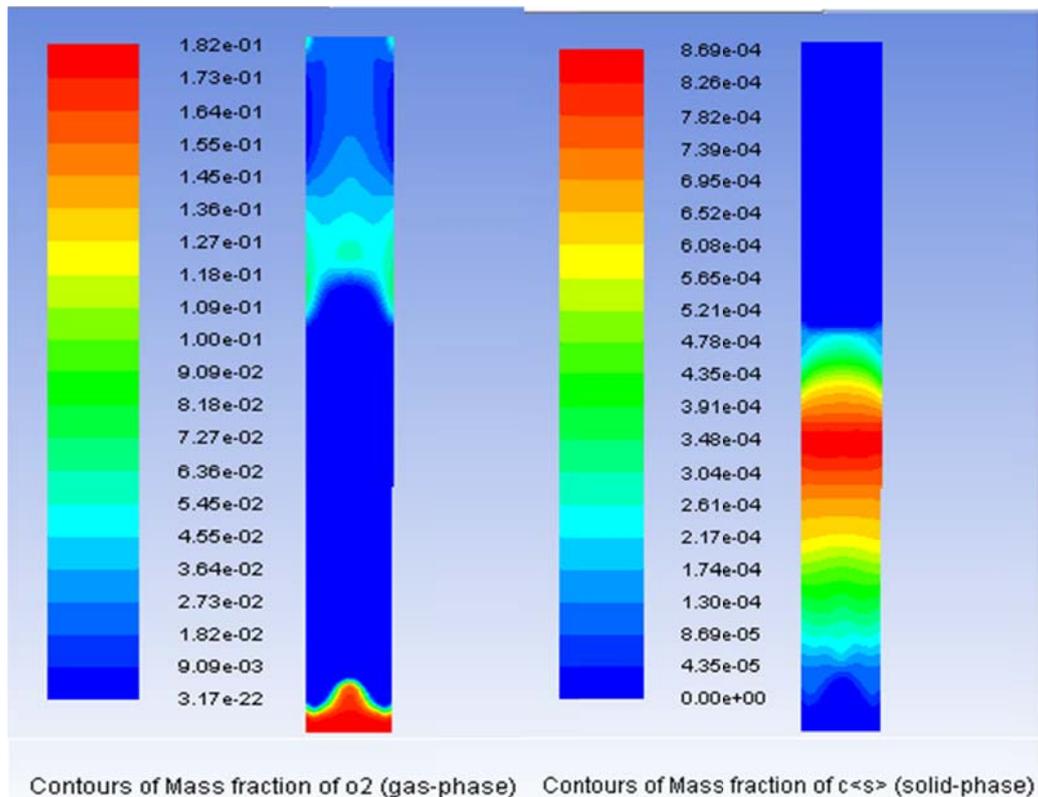


圖 4-8、 O_2 分佈圖

圖 4-9、 $C(s)$ 分佈圖

觀察氧氣之分佈，下方入口處氧氣濃度極高，而隨著高度上升，氧氣之濃度發生陡降的現象，經由氧氣分佈圖與 $C(s)-O_2$ 比較後，發現此區進行氧氣與焦煤的燃燒反應，氧氣在此區大量消耗，故有氧氣濃度陡降的情形發生，此外，由圖 10-(a)、圖 10-(b)、圖 10-(c)三者反應速率圖與圖 4-8 氧氣分佈圖比較，可知氧氣濃度較高之區域燃燒反應會優先進行，待到氧氣耗盡後，焦煤之氣化反應才開始進行。

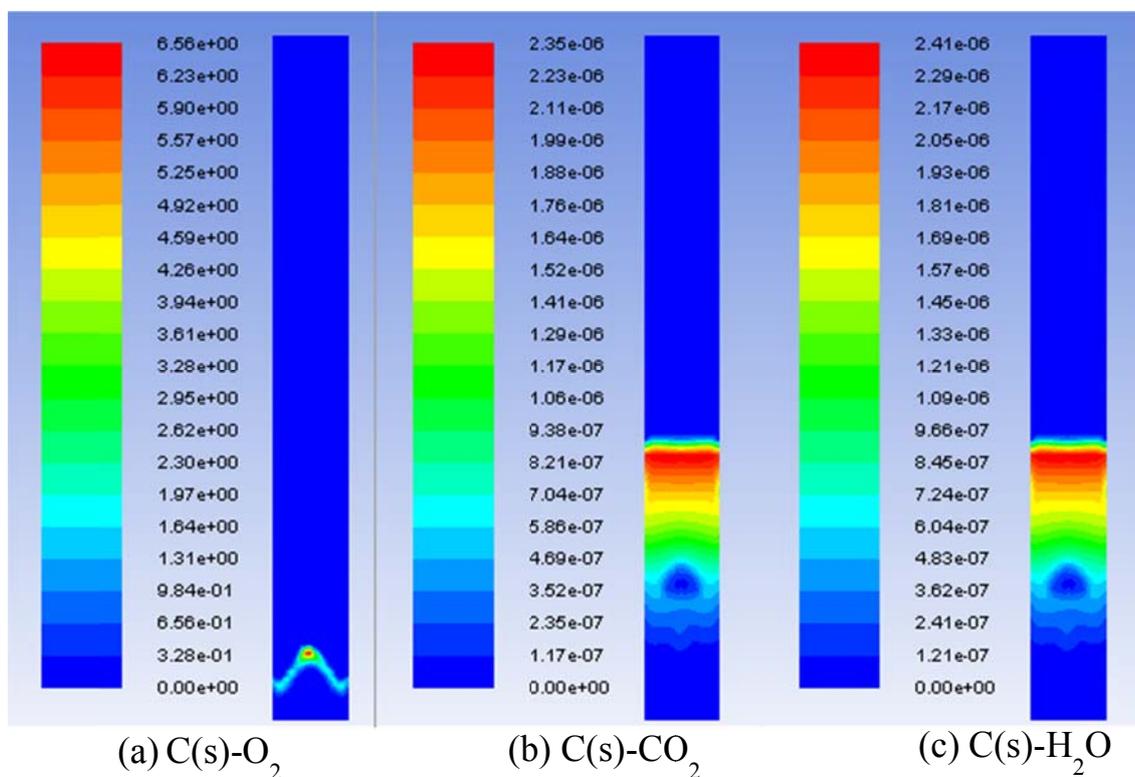


圖 4-10、 $C(s)$ 相關之反應速率

將反應速率分佈與文獻比對，吾人發現反應發生之位置有相同之趨勢，靠近入口處之低區域主要反應為燃燒反應，而後隨著高度上升，C(s)-CO₂ 與 C(s)-H₂O 開始發展。

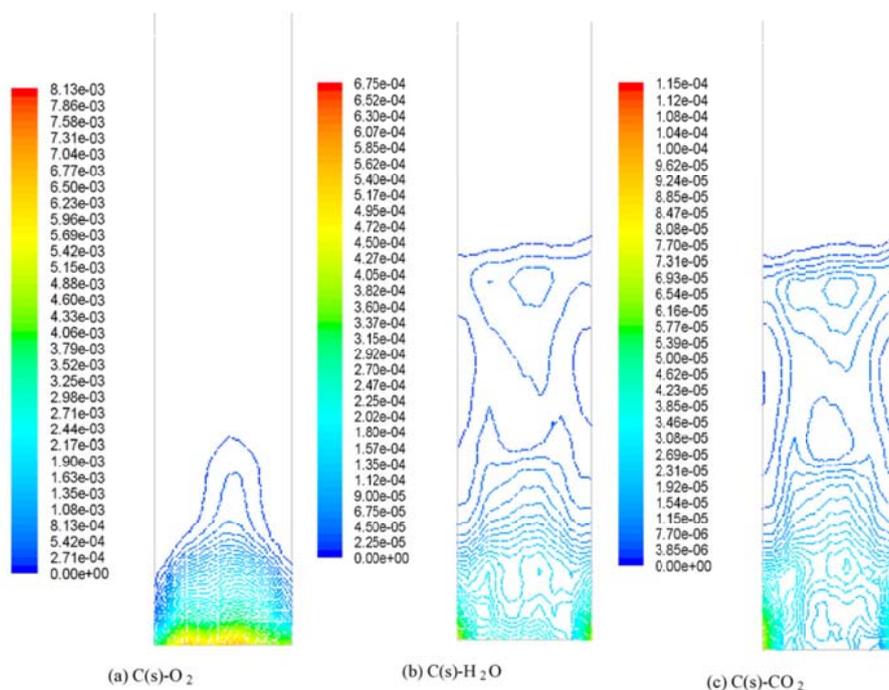


圖 4-11、C(s)相關之反應速率【45】

伍、結論

本研究以計算流體力學軟體 Ansys FLUENT 為基礎，建立流體化床氣化分析模型。該計算模型對流體化床內部現象流場現象以及焦煤氣化進行可視化分析，此分析模式展示氣泡的產生、氣泡對流場的影響以及氣化爐內部化學反應機制。本計畫已完成之工作項目包括：建立氣化爐幾何模型、建立多相流之分析模型、建立氣化與熱輻射模式、建立顆粒流分析模式、建立紊流模式、冷流流場與文獻比對以及反應速率與文獻比對。結果重點分述如下：

一、流場部分：

1. 氣泡會先於壁面附近產生，挾帶著粒子逐漸向中心靠攏並向上移動。氣泡破裂後，粒子將產生向下的速度並撞擊床沙。床沙頂部中心處震盪之高度變化較為平緩。
2. 固體粒子所能達到之最高高度約為 1.4 公尺，故異相反應發生於高度 1.4 公尺以下之區域。

二、化學反應機制部分：

1. 異相反應發生在氣化爐下方，其中氧氣濃度高的區域，燃燒反應為優勢反應
2. 當氧氣消耗殆盡後， $C(s)-CO_2$ 與 $C(s)-H_2O$ 始成為優勢反應。

陸、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," *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 24, pp. 545-564, 1998.
- 【4】 DOE, "Commercial-Scale Demonstration of the Liquid Phase Methanol (LPMEOH) Process", *FETC*, 2000.
- 【5】 洪福亮, "煤炭氣化技術之應用", 2001.
- 【6】 經濟部能源局, *能源統計手冊*, 2008.
- 【7】 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.
- 【8】 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.
- 【9】 <http://www.power-technology.com/projects/isab/isab1.html>
(2014/12/05 accessed)

- 【10】 周至成, 賴維祥, 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.
- 【11】 陳維新, 陳建中, 蔡慶達, 陳建勳, 吳世豐與宋勁賢, "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.
- 【12】 Smoo LD and Pratt DT, *Pulverized Coal Combustion and Gasification: Theory and Applications for Continuous Flow Processes*, Kluwer Acad.Publrs, 1979..
- 【13】 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.
- 【14】 Smoot LD and Smith PJ, *Coal Combustion and Gasification*, Plenum Press, New York, 1985.
- 【15】 Tree DR, Black DL, Rigby JR, McQuay MQ and Webb BW, "Experimental Measurement in the BYU Controlled Profile Reactor," *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 24, pp. 355-383, 1998.
- 【16】 鍾文清, "IGCC 發電方式簡介", *技術與訓練* 23 卷, 6 期, 127-133, 1998.
- 【17】 <http://scitechvista.nsc.gov.tw/zh-tw/Articles/C/0/12/10/1/1420.htm>
(2014/12/05 accessed)

- 【18】 Singh RI, Brink A, Hupa M, "CFD Modeling to Study Fluidized Bed Combustion and Gasification," *Applied Thermal Engineering*, Vol. 52, pp. 587-588, 2013.
- 【19】 http://beeindia.in/energy_managers_auditors/documents/guide_books/2Ch6.pdf (2014/12/09 accessed)
- 【20】 Matsuoka K, Hosokai S, Kuramoto K, and Suzuki Y, "Enhancement of Coal Char Gasification Using a Pyrolyzer – Gasifier Isolated Circulating Fluidized Bed Gasification System," *Fuel Processing Technology*, Vol. 109, pp. 43-48, 2013
- 【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】 Smoot LD, "Coal Gasification," *Encyclopedia of Energy Technology and the Environment*, Vol. 4, pp. 769-792, 1995.
- 【24】 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.
- 【25】 工研院能資所與台電綜合研究所, "煤炭氣化複循環發電機組可行性研究期末報告", 1991.

- 【26】 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.
- 【27】 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.
- 【28】 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, No. 5, pp. 405-433, 2002.
- 【29】 Skodras G, Kaldis SP, Sakellaropoulos GP, Sofialidis D and Faltsi O, "Simulation of a molten bath gasifier by using a CFD code," *Fuel*, Vol. 82, No. 15-17, pp. 2033-2044, 2003.
- 【30】 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, No. 5, pp. 611-617, 2006.
- 【31】 Syred N, Kurniawan K, Griffiths T, Galton T and Ray R,

"Development of Fragmentation Models for Solid Fuel

Combustion and Gasification as Subroutines for Inclusion in CFD

Codes," *Fuel*, Vol. 86, No. 14, pp. 2221-2231, 2007.

【32】 Grabner M, Ogriseck S and Meyer B, "Numerical Simulation of Coal Gasification at Circulating Fluidised Bed Conditions," *Fuel Processing Technology*, Vol. 88, N.. 10, pp. 948-958, 2007.

【33】 Wang T, Silaen A, Hsu HW, and Shen CH, "Investigation of Heat Transfer and Gasification of Two Different Fuel Injectors in an Entrained Flow Coal Gasifier", *Journal of Thermal Science and Engineering Applications*, vol. 2, p. 011001 (10 page), 2010

【34】 Silaen A and Wang T, "Effect of turbulence and devolatilization models on coal gasification simulation in an entrained-flow gasifier", *International Journal of Heat and Mass Transfer* vol. 53, pp. 2074-2091, 2010.

【35】 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.

【36】 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.

【37】 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.

- 【38】 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.
- 【39】 ANSYS , *ANSYS FLUENT 14.0 Theory Guide*, ANSYS, Inc., Southpointe, 2011.
- 【40】 Lun C, Savage S, Jeffrey D, Chepurniy N, "Kinetic Theories for Granular Flow: Inelastic Particles in Couette Flow and Slightly Inelastic Particles in a General Flow Field," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 140, pp. 223-256, 1984.
- 【41】 Gidaspow D, *Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions*, Academic Press, London, 1994.
- 【42】 Launder BE, Spalding DB, *Lectures in Mathematical Models of Turbulence*, Academic Press, London, England, 1972.
- 【43】 Yu L, Lu J, Zhang X, and Zhang S, "Numerical simulation of the bubbling fluidized bed coal gasification by the kinetic theory of granular flow (KTGF)," *Fuel*, Vol. 86, pp. 722-734, 2007.
- 【44】 Ocampo A, Arenas E, Chejne F, Espinela J, London C, Aguirre J, *et al.*, "An experimental study on gasification of Colombian coal in fluidised bed," *Fuel*, Vol. 82, pp. 161-164, 2003.
- 【45】 Xiaofang Wang, Jin B, and Zhong W, "Three-dimensional simulation

of fluidized bed coal gasification", Chemical Engineering and Processing, vol. 48, pp. 695-705, 2009.