

شبیه‌سازی عددی فرآیند گازی کردن زیرزمینی زغالسنگ (UCG) با هدف تعیین پارامترهای عملیاتی در مقیاس تجاری، مطالعه موردی؛ لایه K10 منطقه تخت

امین جوکار^{۱*}، مهدی نجفی^۲، فرهنگ سرشکی^۳

۱- کارشناس ارشد، دانشکده مهندسی معدن، نفت و ژئوفیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود

۲- دانشیار، دانشکده مهندسی معدن و متالورژی، دانشگاه بزد

۳- استاد، دانشکده مهندسی معدن، نفت و ژئوفیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود

(دریافت: تیر ۱۳۹۷، پذیرش: شهریور ۱۳۹۸)

چکیده

فرآیند تبدیل به گاز کردن زیرزمینی زغالسنگ یک فرآیند سازگار با محیط‌زیست است که در آن لایه‌های زغالسنگ به صورت برج‌ها به گاز تبدیل شده و سپس استخراج می‌شوند. هدف اصلی از اجرای فرآیند UCG، تولید گاز سنتزی دارای ارزش حرارتی و یا تولید هر یک از گازهای حاصل از فرآیند UCG (مثلاً تولید هیدروژن) است. پیش‌بینی مقدار و ارزش حرارتی گاز تولیدی پیش از اجرای فرآیند UCG، برای انجام تحلیل‌های اقتصادی ضروری است. از این رو در این پژوهش یک مدل با استفاده از نرم‌افزار کامسول توسعه داده شده که قادر است تاثیر پارامترهای عملیاتی را بر مقدار، ترکیب و ارزش حرارتی گاز تولیدی پیش‌بینی نماید. در این پژوهش یک الگوی جدید برای گازی کردن کل زغالسنگ موجود در پهنه‌های استخراجی معرفی شده است. طبق این الگو که مراحل آن توسط یک الگوریتم نشان داده شده است، علاوه بر این که کل زغالسنگ موجود در هر پهنه تبدیل به گاز می‌شود؛ ارزش حرارتی گاز تولیدی در حد مورد نیاز به دست می‌آید. الگوی ارائه شده در این پژوهش با یک مطالعه موردی برای لایه K10 منطقه تخت، معرفی شده است. در نهایت پارامترهای عملیاتی برای تولید گاز سنتزی با مقدار و ارزش حرارتی مناسب برای گازی کردن لایه K10 منطقه تخت به دست آمده است. نتایج نشان می‌دهد که در یک دوره ۱۱ ماهه باید ۹ کارگاه همزمان با هم فعال باشند و پارامترهای عملیاتی در هر کارگاه شامل دما، فشار کاواک، نرخ تزریق اکسیژن، نرخ تزریق بخار آب و زمان عملیات به ترتیب باید ۱۲۷۳ کلوین، ۱ مگاپاسکال، ۱۰ مول بر ثانیه، ۲۰ مول بر ثانیه و ۱۱ ماه باشد. در این صورت لایه K10 می‌تواند خوراک یک نیروگاه برق ۲۷ مگاواتی سیکل ترکیبی گازی (IGCC) را به مدت ۲۲ سال تامین کند.

کلمات کلیدی

UCG، پارامترهای عملیاتی، شبیه‌سازی عددی، ارزش حرارتی گاز سنتزی، لایه K10 منطقه تخت

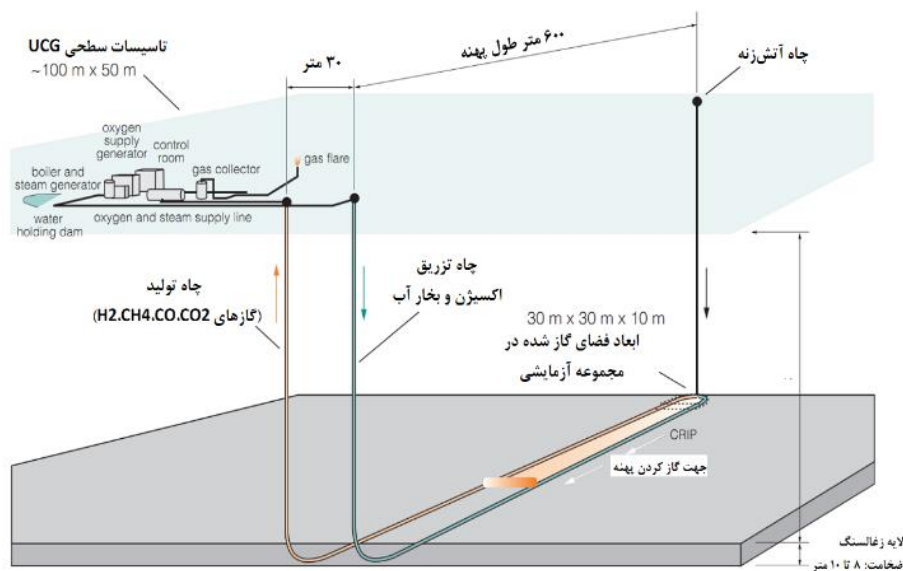
* عهده دار مکاتبات: amin_jowkar@yahoo.com

۱- مقدمه

تولید متانول، تولید سوخت مایع و هیدروژن طبیعی قابل استفاده است [۲، ۳].

روش‌های مختلفی در سراسر دنیا برای اجرای فرآیند UCG ابداع و بعضاً اجرا شده است. در حال حاضر روش منبع احتراق قابل کنترل^۱ (CRIP) برای اجرای UCG در مقیاس تجاری بیش از سایر روش‌ها مورد توجه است. در شکل ۱ یکی از پیشرفته‌ترین مجموعه‌های UCG به روش CRIP موازی (دو کاناله) در بلاوود کریک^۲ استرالیا نشان داده شده است. در این کارگاه نخست دو چاه قائم (چاه‌های تزریق و تولید) با فاصله ۳۰ متر از یکدیگر حفر شده است. این دو چاه در کف لایه زغالسنگ با استفاده از حفاری جهت‌دار به طول ۶۰۰ متر پیشروی کرده و انتهای آنها با استفاده از یک چاه قائم (چاه آتش‌زنه) به هم وصل شده است [۴].

در فرآیند تبدیل به گاز کردن زیرزمینی زغالسنگ (UCG: Underground Coal Gasification)، لایه‌های زغالسنگ با یک فرآیند پیشرفته ترموشیمیایی به صورت برج‌ها در زیر زمین به گاز سنتزی تبدیل می‌شود [۱]. مهم‌ترین و اصلی‌ترین گازهایی که در فرآیند UCG تولید می‌شوند، گازهای CO، CO₂، H₂ و CH₄ هستند که ترکیب آنها گاز سنتزی نامیده می‌شود. در اجرای عملیات UCG با توجه به نیاز صنایع مختلف، هدف می‌تواند تولید هر یک از این گازها (مثلاً تولید هیدروژن) و یا تولید گاز سنتزی دارای ارزش حرارتی باشد. گاز حاصل از فرآیند UCG برای تولید برق، گاز شهری، صنایع شیمیایی مانند



شکل ۱: شمایی از روش UCG از نوع CRIP دو کاناله در مجموعه بلاوود کریک استرالیا [۴]

بخش‌هایی از اطلاعات موجود برای اجرای موفق این روش، انحصاری و مخصوص برخی شرکت‌های خاص (شرکت‌های اجرا کننده UCG مانند شرکت لینک انرژی^۳) است و در اختیار عموم قرار نگرفته است. پارامترهای زیادی در اجرای موفق عملیات UCG موثر است. این پارامترها را می‌توان به دو دسته قابل کنترل و غیرقابل کنترل طبقه‌بندی نمود. عواملی مانند نرخ تزریق اکسیدان، فشار گاز داخل فضای استخراجی، دما و مولفه‌های طراحی، عوامل قابل کنترل بوده و سایر عوامل مانند خصوصیات زغالسنگ و سنگ‌های اطراف آن، میدان جریان گازهای واکنشی در داخل فضای استخراجی و هجوم جریان آب عوامل غیرقابل کنترل

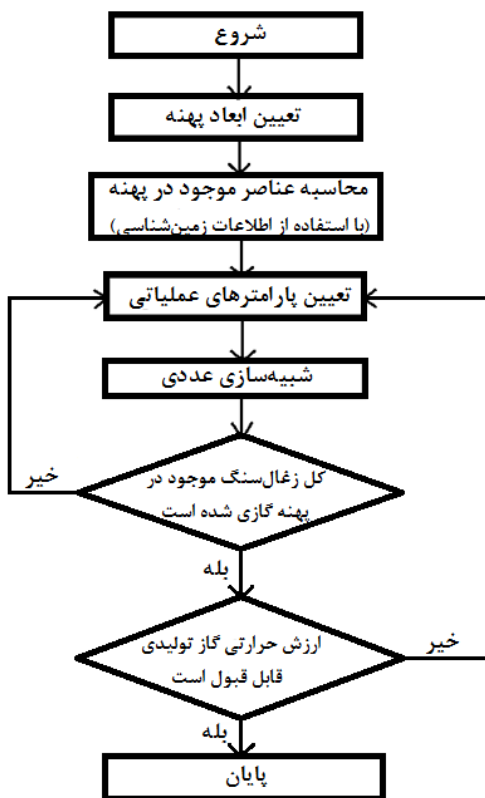
روش گازی کردن زیرزمینی زغالسنگ در حال حاضر در بسیاری از کشورهای دنیا از جمله استرالیا، روسیه، ایالات متحده آمریکا، کانادا، اتحادیه اروپا و... در حال توسعه و پیشرفت است اما این روش تا به حال در کشور ما اجرا نشده است [۴]. به منظور توسعه صنعت معدن در کشور، بررسی چنین روش‌های جدیدی برای ذخایر معدنی کشور ضروری به نظر می‌رسد. طبق گزارش‌های منتشر شده در سراسر دنیا، برای تجاری‌سازی این روش به دلیل پیچیدگی‌های آن، هنوز خلاءهای علمی بسیاری، از جمله عدم وجود اطلاعات دقیق برای تعیین پارامترهای عملیاتی و یا شکل و ابعاد حفره ایجاد شده در زیر زمین؛ وجود دارد.

برای اجرای فرآیند UCG ضروری است پیش‌بینی مقدار و ارزش حرارتی گاز تولیدی است که تا به حال این موضوع در کشور ما بررسی نشده است. هدف اصلی از اجرای فرآیند UCG، تولید گاز دارای ارزش حرارتی است. بنابراین پیش‌بینی مقدار گاز تولیدی و مقدار ارزش حرارتی آن برای اجرای فرآیند UCG برای انجام تحلیل‌های اقتصادی ضروری است. اگرچه در این زمینه تا به حال در کشور ما پژوهش مستقلی انجام نشده است اما مطالعات زیادی بر روی تاثیر پارامترهای عملیاتی بر مقدار، ترکیب و ارزش حرارتی گاز تولیدی توسط پژوهشگران در کشورهای دیگر انجام شده است. در ادامه مهم‌ترین مطالعات در این زمینه به طور مختصر معرفی شده است.

پرکینز و سهجوالا (۲۰۰۸) یک مدل CFD برای پیش‌بینی ترکیب و ارزش حرارتی گاز تولیدی توسعه داده‌اند، نتایج بررسی‌های آنها نشان داده است که ارزش حرارتی گاز تولیدی به واکنش‌پذیری زغالسنگ و نسبت سطح در حال واکنش به واحد حجم داخل کانال، بسیار حساس است [۱۳]. داگوپاتی و همکاران (۲۰۱۱) یک پژوهش گسترده برای بررسی رشد کاواک و تاثیر پارامترهای عملیاتی (مانند زمان عملیات و ترکیب گاز تزریقی) بر ارزش حرارتی گاز تولیدی توسعه داده‌اند [۱۴]. اندریانوپولوس و همکاران (۲۰۱۵)، واکنش‌های شیمیایی در فرآیند UCG را با نرم‌افزار Aspen Plus شبیه‌سازی کرده و در نهایت کیفیت گاز تولیدی را تحت شرایط مختلف بررسی کرده‌اند [۱۵]. زوگالا و جانازیک (۲۰۱۵) یک شبیه‌سازی CFD توسط نرم‌افزار ANSYS Fluent با هدف بررسی تاثیر بخار آب به عنوان عامل گازی شدن بر ترکیب و ارزش حرارتی گاز تولیدی توسعه داده‌اند. نتایج بررسی‌های آنها نشان داده است که با افزایش مقدار بخار آب، ارزش حرارتی گاز تولیدی تا جای مشخصی افزایش می‌یابد و پس از آن به دلیل کاهش زیاد دما، واکنش‌های شیمیایی تحت تاثیر قرار می‌گیرد و ارزش حرارتی گاز تولیدی کم می‌شود [۱۶]. لاسیاک و همکاران (۲۰۱۶) با شبیه‌سازی فرآیند گازی کردن زغالسنگ در آزمایشگاه، به بررسی مقدار و ترکیب گاز تولیدی تحت شرایط فشاری مختلف پرداخته‌اند [۱۷]. ویاتووسکی و همکاران (۲۰۱۶) با شبیه‌سازی فرآیند UCG در آزمایشگاه تحت حداکثر فشار ۵ مگاپاسکال و حداکثر دما به ۱۶۰۰ درجه سانتی‌گراد به

هستند [۵-۸]. اگرچه در کشور ایران هنوز فرآیند UCG به طور عملی اجرا نشده، اما در سال‌های اخیر پژوهش‌های خوبی در این زمینه انجام شده است و به نظر می‌رسد که این روند رو به تکامل است. در ادامه چند مورد از مهم‌ترین پژوهش‌های انجام شده در این زمینه معرفی می‌شود. طبق گزارش‌های موجود، شروع پژوهش در زمینه UCG با پژوهش موسوی در سال ۱۳۹۰ در دانشگاه یزد شروع شده است. در این پژوهش پایداری فضای استخراجی بین چاه‌های تزریق و تولید، مورد ارزیابی قرار گرفته شده است. بر اساس مدل ارائه شده، علاوه بر پایداری حفره ایجاد شده در زیر زمین (پایداری کاواک^۴) فاصله بین چاه‌های تزریق و تولید به مقدار بهینه به دست می‌آید [۹]. پس از آن لطفی-آزاد نشت گاز از کارگاه‌های استخراج UCG را مورد ارزیابی قرار داد. در این پژوهش با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی^۵ (CFD) به مدل‌سازی عددی نشت گاز از کارگاه استخراج UCG پرداخته شده است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که فشار درون کارگاه تاثیر زیادی بر روی نشت گاز دارد، بنابراین باید در انتخاب این پارامتر دقت بیشتری مبذول شود [۱۰]. جلالی و همکاران پژوهشی برای امکان‌سنجی کاربرد روش UCG برای تولید برق و طراحی یک میدان واقعی UCG در کشور انجام داده‌اند. در این پژوهش طراحی‌های لازم و بررسی‌های فنی و اقتصادی برای گازی کردن لایه K10 منطقه زغالی تخت با هدف تامین خوراک یک نیروگاه برق ۲۷ مگاواتی بر پایه سیکل ترکیبی گازی^۶ (IGCC) انجام شده است. این پژوهش می‌تواند یک الگوی مناسب برای اجرای فرآیند UCG در سایر مناطق مستعد UCG در کشور باشد [۱۱]. نجفی در سال ۱۳۹۳، بر روی تعیین ابعاد پهنه‌های استخراجی در روش UCG پژوهشی را انجام داده است. هدف این پژوهش مدل‌سازی و تحلیل ترمومکانیکی یک پهنه استخراجی UCG بر پایه روش CRIP، به منظور تعیین ابعاد مناسب پهنه‌های استخراجی بوده است. بدین منظور در نهایت یک سری رابطه برای تعیین ابعاد پهنه‌های استخراجی در روش UCG ارائه شده است. مقایسه نتایج حاصل از این پژوهش با داده‌های واقعی از پایلوت‌های UCG در سراسر دنیا، نشان می‌دهد که این مدل بسیار به واقعیت نزدیک است [۲، ۱۲]. بسیاری از مباحث و موضوعاتی که برای اجرای فرآیند UCG در کشور مورد نیاز است، توسط پژوهشگران داخل کشور بررسی شده است. اما یکی دیگر از مباحثی که

نهایت شبیه‌سازی فرآیند در نرم‌افزار COMSOL انجام می‌شود. در این مدل دو شرط گازی شدن کل زغالسنگ موجود در پهنه و قابل قبول بودن ارزش حرارتی گاز تولیدی، بررسی می‌شود. اگر این دو شرط تأیید نشود، به مرحله‌ی تعیین پارامترهای عملیاتی بازگشته و پارامترهای عملیاتی تغییر داده می‌شود، در غیر این صورت طراحی کامل است و نتایج گزارش می‌گردد.



شکل ۲: الگوریتم مدل ارائه شده در این پژوهش

نرم‌افزار COMSOL مجموعه کامل شبیه‌سازی چند فیزیکی است که قادر به حل معادلات دیفرانسیل جزئی (PDE) و کامل (ODE) برای تحلیل و بررسی رفتار سیستم‌های خطی و غیر خطی به روش المان محدود (FEM) در فضاها، یک، دو و سه بعدی است [۱۹]. ماژول شیمی این نرم‌افزار بسیار قدرتمند است و انواع راکتورها در محیط آن تعریف شده و به راحتی قابل استفاده است. به همین دلیل در این پژوهش برای طراحی راکتور و بررسی فرآیند UCG از این نرم‌افزار استفاده شده است.

۲-۱- افزایش ارزش حرارتی گاز تولیدی

برای تولید گاز سنتزی با ارزش حرارتی بیشتر باید واکنش‌های شیمیایی در طول فرآیند UCG مورد بررسی قرار گیرد و در نهایت شرایط مناسب برای کنترل واکنش‌ها

بررسی ترکیب و ارزش حرارتی گاز تولیدی در زمان‌های مختلف پرداخته‌اند [۱۸].

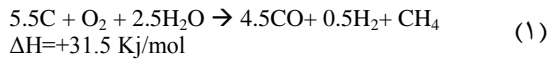
همان‌طور که مشاهده می‌شود اگرچه در زمینه مقدار و ارزش حرارتی گاز تولیدی پژوهش‌های مستقلی در خارج از کشور انجام شده است، اما اطلاعات موجود در این پژوهش‌ها برای اجرای فرآیند UCG کافی نیست و دو ضعف اساسی دارند. اولاً این که در هر یک از پژوهش‌های انجام شده، فقط تأثیر یک یا چند پارامتر عملیاتی بر مقدار و ارزش حرارتی گاز تولیدی بررسی شده است، این در حالی است که همه پارامترهای عملیاتی به طور هم‌زمان بر روی مقدار و ارزش حرارتی گاز تولیدی اثر گذار هستند و در نظر نگرفتن هر کدام، نتایج را به شدت تحت تأثیر قرار می‌دهد. دوماً هر یک از پژوهش‌های انجام شده در مقیاس کوچک و آزمایشگاهی بحث و بررسی شده است و اطلاعات کاملی برای اجرای فرآیند UCG در مقیاس بزرگ (تجاری) در دسترس نیست (این موضوع می‌تواند دلایل سیاسی داشته باشد). بنابراین هدف اصلی در این پژوهش ارائه مدلی برای تعیین پارامترهای عملیاتی در مقیاس تجاری و در نهایت پیش‌بینی مقدار و ارزش حرارتی گاز تولیدی بوده است. در این مدل همه پارامترهای عملیاتی به طور هم‌زمان در نظر گرفته می‌شود و تأثیر هر کدام بر مقدار و ارزش حرارتی گاز تولیدی با تحلیل حساسیت قابل مشاهده است.

۲- توسعه مدل

در این پژوهش یک مدل عددی در نرم‌افزار COMSOL توسعه داده شده است. در مدل ارائه شده می‌توان تأثیر پارامترهای عملیاتی بر ترکیب و ارزش حرارتی گاز تولیدی را پیش از اجرای فرآیند UCG در مقیاس تجاری، پیش‌بینی نمود و مناسب‌ترین طرح اجرایی را با هدف تولید گاز سنتزی با بیشترین ارزش حرارتی انتخاب نمود. الگوریتم مراحل اجرای این مدل به صورت شکل ۲ نشان داده شده است.

همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، در این مدل ابتدا ابعاد پهنه‌های استخراجی مشخص می‌گردد، سپس عناصر موجود در هر پهنه با استفاده از اطلاعات زمین‌شناسی مشخص می‌شود. در ادامه پارامترهای عملیاتی با توجه به تجربیات گذشته (اطلاعات موجود از مجموعه‌های واقعی UCG) و تجهیزات در دسترس، تعیین می‌گردد. در

اکنون با استفاده از قانون هس در علم شیمیایی [۲۰]، چهار واکنش موجود در جدول ۲ با هم جمع شده است. نهایتاً فرمول و آنتالپی مربوطه به صورت رابطه (۱) به دست آمده است.



۳- معرفی منطقه زغالی تخت

منطقه تخت از نظر جغرافیایی در جنوب شرقی شهرستان مینودشت و به فاصله ۱۲ کیلومتری آن واقع شده است. وجه تسمیه این نام از روستای همجوار آن به نام تخت گرفته شده که در شمال شرقی این منطقه قرار گرفته است. منطقه از نظر تقسیمات کشوری تابع استان گلستان و شهرستان آزادشهر و مینودشت است. فاصله این منطقه تا مینودشت ۱۲ کیلومتر بوده که از طریق دو جاده چهل‌چای و جنگلده ارتباط دارد. راه دیگر رسیدن به زغال‌های این منطقه از طریق روستای سوسرا بوده که در جنوب غربی آن واقع شده است. شکل ۳ وضعیت ارتباطی این منطقه را به خوبی نشان می‌دهد [۲۱].

با مطالعه و بررسی عملیات اکتشافی در منطقه تخت نتیجه گرفته می‌شود که بیشتر زغال‌های منطقه تخت مربوط به تریاس فوقانی تا ژوراسیک پایین (کلاریز) هستند. ضخامت زون زغال‌دار منطقه حدود ۶۰۰ متر و تعداد کل لایه‌های زغالی در آن حدود ۲۶ لایه است. مجموع کل ضخامت لایه‌های زغالی این منطقه به طور متوسط ۱۲/۷۷ متر و ضریب زغال‌خیزی آن ۲/۲ درصد است. تعداد لایه‌های زغالی قابل کار در منطقه، شش لایه است که عملیات زمین‌شناسی بر روی این لایه‌ها انجام گرفته است. یکی از فاکتورهای بسیار خوب این منطقه نزدیک بودن لایه‌های قابل کار به یکدیگر است. ضخامت زون زغالی قابل کار حدود ۱۵۰ متر است و کلیه لایه‌های قابل کار در این بخش قرار گرفته است. مجموع ضخامت لایه‌های زغالی در این بخش ۱۰/۸۷ متر و ضریب زغال‌خیزی آن ۷/۲۵ درصد است. لایه‌های اقتصادی به ترتیب سنی از قدیم به جدید عبارتند از: K20 - K19 - K17 - K11 - K10 - K8 [۲۱].

و در نتیجه افزایش ارزش حرارتی گاز تولیدی مهیا شود. طبق گزارش‌های موجود، ۹ واکنش اصلی در فرآیند UCG اتفاق می‌افتد. این واکنش‌ها در دو فاز همگن (بین گازها) و ناهمگن (بین گازها و جسم جامد یعنی زغالسنگ) انجام می‌شود. مکانیزم این ۹ واکنش در جدول ۱ نشان داده شده است. در این جدول واکنش‌های ۱ تا ۵ در فاز همگن و واکنش‌های ۶ تا ۹ در فاز ناهمگن اتفاق می‌افتد [۱۳]. در این پژوهش، واکنش‌ها در فشار کم و دمای نسبتاً بالا فرض شده است. بنابراین واکنش‌های ۴ و ۵ در جهت رفت رخ می‌دهد [۱۸].

جدول ۱: واکنش‌های اصلی در فرآیند UCG [۱۳] و [۱۸]

شماره	واکنش
۱	$H_2 + 1/2 O_2 \rightarrow H_2O$
۲	$CO + 1/2 O_2 \rightarrow CO_2$
۳	$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$
۴	$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$
۵	$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3 H_2$
۶	$C + O_2 \rightarrow CO_2$
۷	$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$
۸	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$
۹	$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$

طبق مطالعات آزمایشگاهی داگوپاتی و همکاران (۲۰۱۱) برای تولید گاز سنتزی با بیشترین ارزش حرارتی، نسبت بخار آب (H_2O) به اکسیژن (O_2) باید ۲/۵ به ۱ باشد [۱۴]، بنابراین در جدول ۱، طرفین واکنش ۷ در ۲/۵ ضرب شد تا این نسبت برقرار شود. بازنویسی معادلات رشد کاواک (فاز ناهمگن) با توجه به نسبت ذکر شده در جدول ۲ آمده است.

جدول ۲: بازنویسی واکنش‌های شیمیایی با اعمال ضرایب

شماره	واکنش	آنتالپی (Kj/mol)
۶	$C + O_2 \rightarrow CO_2$	$\Delta H = -393$
۷	$2.5C + 2.5H_2O \rightarrow 2.5CO + 2.5H_2$	$\Delta H = +131 \times 2.5$
۸	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	$\Delta H = +172$
۹	$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$	$\Delta H = -75$



شکل ۳: موقعیت و راه‌های ارتباطی منطقه زغالی تخت [۲۲]

گرفته است و دارای ضخامت زمین‌شناسی بین ۰/۹۰ متر تا ۲/۳۸ متر است. ضخامت متوسط قابل کار این لایه ۱/۱۸ متر و شیب لایه ۳۰ درجه است. این لایه از چند شعبه زغالی تشکیل شده که از یک تا پنج متغیر است. شعبه زغالی غالب، شعبه یک است و جنس شعبه‌های غیر زغالی آن آرژیلیت است. این لایه از لحاظ یکنواختی، یک لایه یکنواخت با تغییرات کم است. میزان ذخیره این لایه، ۴۶/۴۶۲۹۲۰ تن تخمین زده شده است [۲۱]. جنس کمر بالا و کمر پایین این لایه، رس سنگ است [۲۳]. آنالیز فنی مواد موجود در زغالسنگ در جدول شماره ۳ گزارش شده است.

جدول ۳: آنالیز فنی زغالسنگ لایه K10 منطقه تخت [۲۱]

آنالیز فنی	درصد (%)
رطوبت کل	۷/۵
رطوبت متن (ad)	۱/۹۱
خاکستر (ad)	۱۲/۴۵
مواد فرار (ad)	۳۰/۹۳
کربن ثابت (ad)	۵۴/۷۱
گوگرد (ad)	۰/۵۹

یکی دیگر از اطلاعات زمین‌شناسی مورد نیاز برای مدلسازی فرآیند UCG، مقدار و اجزای مواد فرار موجود در زغالسنگ است که واکنش‌های شیمیایی، مقدار و

۳-۱- کیفیت زغال‌های منطقه تخت

برای بررسی کیفیت زغال‌های منطقه تخت تعداد ۶۳۱ نمونه توسط گروه پی‌جویی شرکت زغالسنگ البرز شرقی برداشت و به آزمایشگاه مرکزی زغالسنگ ارسال شده است. نتایج این آزمایش‌ها به طور خلاصه در ادامه آمده است.

کلیه نمونه‌ها از لحاظ رطوبت، خاکستر، مواد فرار، لایه پلاستیکی، ضریب انقباض حجمی، گوگرد و ارزش حرارتی مورد آزمایش قرار گرفته است. صرف نظر از نمونه‌های اکسیده، رطوبت لایه‌ها بین ۱/۸ - ۱/۲ درصد و خاکستر بین ۴۴/۷ - ۱۱/۲ درصد و مواد فرار بین ۳۷/۵ - ۳۴/۲ درصد در نوسان است. برای مشخص نمودن ارزش حرارتی زغال‌های بالا، تعداد پنج نمونه از لایه‌های مختلف انتخاب و مورد آزمایش قرار گرفته است. این آزمایش‌ها نشان می‌دهد که ارزش حرارتی لایه‌ها بین ۸۱۳۲ - ۷۹۸۵ کیلوکالری بر کیلوگرم متغیر است [۲۱].

۳-۲- مشخصات اکتشافی لایه زغالی K10

لایه زغالی K10 به طور متوسط ۱۵ متر بالای لایه K8 و ۲۲ متر زیر لایه K11 قرار گرفته است. گسترش طولی کار شده روی این لایه ۱۳/۳ کیلومتر است که با حفر ۱۴۲ گمانه، ۵ تونل و ۵ اکلون مورد ارزیابی قرار

زغالسنگ مارک گازی چرب (گ ژ) در البرز شرقی و بسیاری از نواحی زغالی ایران به مقدار زیادی یافت می‌شود. این نوع زغال دارای جلای شیشه‌ای و رنگ پودر قهوه‌ای تیره است. مقدار مواد فرار آن، ۳۱ تا ۳۷ درصد، مقدار کربن، ۸۳ تا ۸۴ درصد، مقدار هیدروژن، ۵/۵ تا ۹/۴ درصد و مقدار (O+N)، معادل ۷/۷ تا ۹/۹ درصد متغیر است. چهار گروه تکنولوژیک این نوع زغالسنگ عبارت اند از گ ژ ۶، گ ژ ۱۰، گ ژ ۱۴ و گ ژ ۱۹ [۲۵].

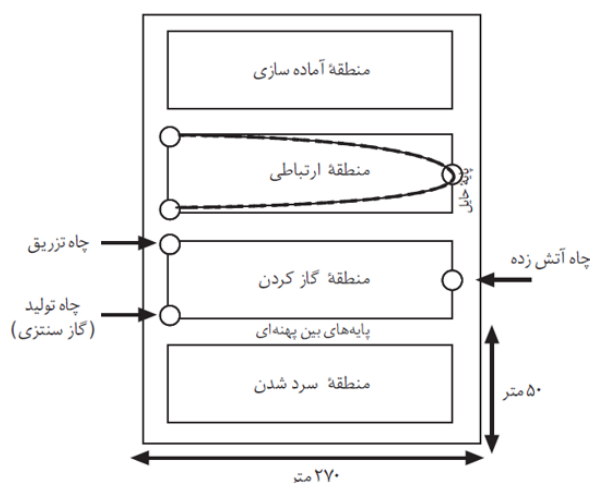
۴- توسعه الگوی گازی کردن لایه K10

در سال ۱۳۹۲، یک تحقیق توسط جلالی و همکاران برای گازی کردن زیرزمینی لایه زغالی K10 منطقه تخت انجام شده است. هدف این پروژه تامین گاز سنتزی مورد نیاز برای یک نیروگاه برق ۲۷ مگاواتی بوده است. در این پروژه، روش CRIP دو کاناله (موازی) برای طراحی الگوی گازی کردن انتخاب شده است. ابعاد پهنه‌ها به صورت شکل ۵، ۳۰ متر در ۲۶۰ متر، ضخامت لایه ۲/۲ متر و چگالی زغالسنگ ۱/۵۵ تن بر متر مکعب، در نظر گرفته شده است. در این پژوهش فرض شده است که در هر ساعت ۴۳۰۰۰ مترمکعب گاز سنتزی با ارزش حرارتی ۵۰۰۰ کیلوکالری بر کیلوگرم تولید می‌شود. ابعاد هر پهنه ۱۷۱۶۰ متر مکعب (۲۶۰×۳۰×۲/۲) و میزان زغال موجود در هر پهنه ۲۶۵۹۸ تن (۲۶۰×۳۰×۲/۲×۱/۵۵) در نظر گرفته شده است [۱۱].

ارزش حرارتی گاز تولیدی را به میزان قابل توجهی تاثیر قرار می‌دهد. مواد فرار زغالسنگ شامل یک سری گازهای محبوس در زغال سنگ است که وقتی دمای زغالسنگ به ۷۵۰ تا ۹۵۰ درجه سانتی‌گراد برسد، همه آنها به صورت گاز یا بخار از زغالسنگ خارج می‌شوند. مواد فرار شامل ترکیب‌های گازی از قبیل CO_2 ، CO ، CH_4 ، SO_2 ، NH_3 ، Cl ، N_2O و بخار آب هستند [۲۴]. در ادامه ویژگی‌های کیفی لایه‌های زغالی منطقه تخت به صورت جدول ۴ و ویژگی‌های زغالسنگ با مارک گازی چرب (گ ژ) ذکر شده است. به دلیل در دسترس نبودن مقدار اجزای مواد فرار در گزارشات اکتشافی مربوط به لایه K10، با توجه به جدول ۴ و اطلاعات عمومی در مورد مارک زغالی گ ژ-۱۰ این مقادیر به صورت تقریبی در جدول ۶ در نظر گرفته شده است.

جدول ۴: ویژگی‌های کیفی لایه‌های زغال در منطقه تخت [۲۱]

نام لایه	Y (mm)	IR	V (%)	A (%)	مارک تکنولوژیک
K8	۸-۱۲	۸۷-۸۹	۳۳-۳۷	۲۵	گ ژ-۱۰
K10	۸-۱۲	۸۷-۸۹	۳۳-۳۷	۱۷	گ ژ-۱۰
K11	۸-۱۲	۸۷-۸۹	۳۳-۳۷	۱۲	گ ژ-۱۰
K17	۸-۱۲	۸۷-۸۹	۳۳-۳۷	۲۰	گ ژ-۱۰
K19	۸-۱۲	۸۷-۸۹	۳۳-۳۷	۲۵	گ ژ-۱۰
K20	۸-۱۲	۸۷-۸۹	۳۳-۳۷	۱۷	گ ژ-۱۰



شکل ۴: ابعاد پهنه‌ها و محل چاه‌ها برای تبدیل به گاز کردن لایه K10 منطقه تخت [۱۱]

است. بدین صورت که با شبیه‌سازی فرآیند گازی کردن برای لایه K10، فرض تولید هر ساعت ۴۳۰۰۰ متر

در پژوهش حاضر طراحی‌های انجام شده توسط جلالی و همکاران، پذیرفته شده و کار ایشان توسعه داده شده

جدول ۷: مقدار عناصر موجود در یک پهنه لایه K10

نام	نماد	مقدار (میلیون مول)
کربن	C	۱۲۱۱/۵۳
بخار آب	H ₂ O	۱۱۰/۷۳
متان	CH ₄	۱۲۰/۸۶
دی اکسید کربن	CO ₂	۶۴/۹۷
منو اکسید کربن	CO	۱۰۲/۰۸

۵-۲- تعیین پارامترهای عملیاتی

در فرآیند UCG هدف ممکن است تولید گاز سنتزی، تولید هیدروژن، تولید متان و یا تولید سایر گازهای موجود در زغالسنگ باشد. در این بخش برای لایه زغالی K10 فرض شده است که هدف تولید گاز سنتزی با بیشترین ارزش حرارتی باشد.

اکنون با استفاده از واکنش شیمیایی به دست آمده از قانون هس (رابطه ۱)، برای فاز ناهمگن؛ مقدار مول H₂O، O₂ که وارد واکنش در فاز ناهمگن می‌شوند طبق روابط استوکیومتری، به صورت جدول ۸ به دست آمده است. چون مقداری از H₂O تزریقی مورد نیاز در خود زغالسنگ با عنوان رطوبت محتوا، وجود دارد پس این مقدار، از مقدار مورد نیاز کم شده است.

جدول ۸: مقدار H₂O و O₂ لازم برای مصرف در فاز ناهمگن در

هر کارگاه UCG در لایه K10

مقدار (میلیون مول)	اکسیدان
۲۲۰/۲۷	اکسیژن (O ₂)
۴۳۹/۹۶	بخار آب (H ₂ O)

طبق مدل ارائه شده در این پژوهش برای تعیین پارامترهای عملیاتی، در انتخاب زمان کل عملیات و دبی تزریقی اختیار داریم (با توجه به شرایط طراحی ابتدا مقدار یکی از این دو پارامتر تعیین می‌شود و سپس با استفاده از روابط، دیگری به دست می‌آید)، اما بهتر است ابتدا با توجه به قطر لوله و سرعت حرکت سیال در لوله، دبی تزریقی محاسبه شده سپس زمان کل عملیات محاسبه شود. فرض شده که در این پژوهش قطر لوله تزریق ۲۰ سانتی‌متر و سرعت حرکت سیال در لوله ۱/۳۴ متر بر ثانیه باشد. در این صورت پارامترهای عملیاتی با توجه به مراحل قبل و روابط ارائه شده در جدول ۹، محاسبه شده است. نتایج محاسبات مربوط به این قسمت به همراه سایر فرضیات برای ساده‌سازی مسئله در جدول ۱۰ آورده شده است.

مکعب گاز سنتزی با ارزش حرارتی ۵۰۰۰ کیلوکالری بر کیلوگرم، توسعه داده و به واقعیت تبدیل شده است (پارامترهای عملیاتی برای واقعیت بخشیدن به این فرض به دست آمده).

۵- شبیه‌سازی فرآیند UCG برای لایه K10 منطقه تخت

۵-۱- تعیین عناصر موجود در هر پهنه

با توجه به اطلاعات زمین‌شناسی لایه K10 منطقه تخت، خلاصه اطلاعات مورد نیاز برای مدلسازی در جدول‌های ۵ و ۶ آورده شده است. لازم به ذکر است که با توجه به در دسترس نبودن میزان دقیق اجزای مواد فرار، این مقادیر با توجه به مارک زغالی گ ژ ۱۰ و توضیحات ارائه شده در بخش (۳-۲) به طور تقریبی تخمین زده شده است.

جدول ۵: مشخصات زغالسنگ لایه K10 [۲۱]

درصد (%)	آنالیز فنی
۱/۵۵	چگالی (تن بر متر مکعب)
۳۰/۹۳	مواد فرار (درصد وزنی)
۲۴/۳۰	خاکستر (درصد وزنی)
۷/۵۰	رطوبت محتوی (درصد وزنی)
۵۴/۷۱	کربن ثابت (درصد وزنی)

جدول ۶: مشخصات مواد فرار زغالسنگ لایه K10

CH ₄	CO ₂	CO	NH ₃ , CL, N ₂ O, SO ₂ and othe (درصد وزنی)
(درصد وزنی)	(درصد وزنی)	(درصد وزنی)	
۷/۲۹	۱۰/۷۵	۱۰/۷۵	۲/۱۴

اکنون با توجه به این که حجم کل زغالسنگ موجود در هر پهنه در بخش قبل محاسبه شده است (۱۷۱۶۰ متر مکعب)، با استفاده از اطلاعات زمین‌شناسی و وزن مولکولی عناصر، می‌توان اجزای موجود در هر پهنه را به طور جداگانه محاسبه کرد. در ادامه عناصر موجود در هر پهنه به صورت جدول ۷ به دست آمده است.

جدول ۹: روابط ارائه شده برای محاسبه پارامترهای عملیاتی

شماره	رابطه	نام پارامتر	نماد	واحد	ملاحظات
۱	$Q = V \cdot A$	دبی تزریق	Q	مترمکعب بر ثانیه	
		سرعت	V	متر بر ثانیه	
		سطح مقطع	A	مترمربع	
۲	$\rho_{in} = \frac{N \times P}{R \times T}$	چگالی گاز ورودی	ρ_{in}	مول بر مترمکعب	
		مول گاز	N	عدد	
		فشار	P	پاسکال	
		ثابت گازها	R	ژول بر مول کلوین	
		دما	T	درجه کلوین	
۳	$Q'_{O_2} = Q_{O_2} \times \rho$	دبی مولی تزریق اکسیژن	Q'_{O_2}	مول بر ثانیه	
		دبی تزریق	Q_{O_2}	مترمکعب بر ثانیه	
		چگالی گاز در کاواک	ρ	مول بر متر مکعب	
۴	$T_t = \frac{mol_{O_2}}{Q'_{O_2}}$	زمان عملیات	T_t	ثانیه	
		مقدار مول تزریقی اکسیژن	mol_{O_2}	مول	
۵	$Q'_{H_2O} = \frac{mol_{H_2O}}{T_t}$	دبی مولی تزریق اکسیژن	Q'_{O_2}	مول بر ثانیه	
		دبی مولی تزریق بخار آب	Q'_{H_2O}	مول بر ثانیه	
		مقدار مول تزریقی بخار آب	mol_{H_2O}	مول	
		زمان عملیات	T_t	ثانیه	

جدول ۱۱: پارامترهای سنتیکی واکنش‌های شیمیایی همگن [۱۳]

Ek	ka	Ak	معادله سرعت واکنش	واکنش k
۱۶۷/۴	-۱/۰	$۲/۵۰ \times ۱۰^{+۱۸}$	$Kf,1[H_2]1/4[O_2]2/3$	۱
۱۶۷/۴	۰/۰	$۳/۹۸ \times ۱۰^{+۱۹}$	$Kf,2[CO][O_2]1/4$	۲
۱۲۵/۵	۰/۰	$۴/۴۰ \times ۱۰^{+۱۵}$	$Kf,3[CH_4]1/2[O_2]5/4$	۳
۱۲/۶	۰/۰	$۲/۷۸ \times ۱۰^{+۱}$	$Kf,4[CO][H_2O]$	۴
۳۰/۰	۰/۰	$۳/۱۱۲ \times ۱۰^{+۱}$	$Kf,5[CH_4][H_2O]$	۵

جدول ۱۲: پارامترهای سنتیکی واکنش‌های شیمیایی

ناهمگن [۱۳]

Ek	ka	Ak	n	واکنش k
۱۷۹/۴	۱/۰	$۲/۵۰۳ \times ۱۰^{+۱۷}$	۱/۰	۶
۲۳۱/۰	۰/۵	$۸/۵۹۳ \times ۱۰^{+۲}$	۰/۵	۷
۲۱۱/۰	۰/۵	$۸/۵۹۳ \times ۱۰^{-۱}$	۰/۵	۸
۱۵۰/۰	۱/۰	$۲/۳۳۷ \times ۱۰^{-۶}$	۱/۰	۹

در ادامه نوع راکتور، نیمه پیوسته ۷ انتخاب شده است، زیرا در این راکتور حجم ثابت نیست و با گذر زمان حجم راکتور افزایش می‌یابد و این دقیقاً اتفاقی است که برای

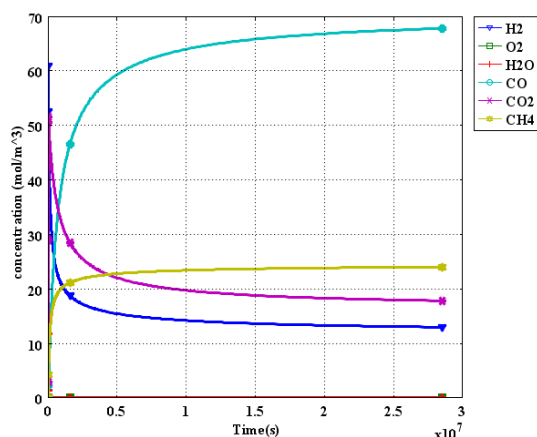
جدول ۱۰: پارامترهای عملیاتی برای یک کارگاه UCG در لایه

K10

پارامتر ورودی	مقدار
دما (k)	۱۲۷۳
فشار (MPa)	۱
ثابت گازها (J/mol.k)	۸/۳۱۴
نرخ تزریق اکسیژن (mol/s)	۱۰/۱۷
نرخ تزریق بخار آب (mol/s)	۲۰/۳۲
زمان عملیات (s)	$۲۱/۶۵ \times ۱۰^۶$

در این مدل برای به دست آوردن کل حجم گاز تولیدی، دما و فشار راکتور ثابت فرض شده است. با توجه به ثابت بودن دما و فشار درون کاواک (به ترتیب ۱۲۷۳ کلوین و یک مگاپاسکال) چگالی گاز درون کاواک طبق رابطه شماره ۲ در جدول ۹، $۹۴/۴۸$ مول بر متر مکعب به دست آمده است. در ادامه ۹ واکنش اصلی که قبل‌تر ذکر شد، در ماژول شیمی نرم‌افزار وارد شده و سنتیک واکنش هم مطابق جدول‌های ۱۱ و ۱۲ وارد شده است.

زغالسنگ می‌شود) شرکت نکرده است و بخشی از آن در فاز همگن مصرف شده است. برای گازی کردن مقدار زغالسنگ باقی‌مانده می‌توان زمان عملیات، فشار، نرخ تزریق بخار آب و یا نرخ تزریق اکسیژن را افزایش داد و یا این که ترکیبی از این حالات را انجام داد (یعنی همه یا چند مورد از پارامترهای ذکر شده تغییر کنند). اگر قرار باشد از بین ۴ پارامتر مذکور فقط یکی افزایش داده شود، طبق بررسی‌های انجام شده، با افزایش زمان عملیات ارزش حرارتی گاز تولیدی بیشتر می‌شود. بنابراین در این مورد برای گازی کردن مقدار زغالسنگ باقی‌مانده، افزایش زمان عملیات، از بین گزینه‌های موجود انتخاب شده است. بنابراین زمان عملیات تا جایی که همه زغالسنگ موجود در پهنه به گاز تبدیل شود، افزایش داده شده است. در نهایت زمان گازی کردن هر پهنه به ۱۱ ماه افزایش داده شده است. نتایج به صورت شکل ۶ و جدول ۱۴ به دست آمده است.



شکل ۶: نمودار غلظت گازهای تولیدی حاصل از یک کارگاه UCG در لایه K10 (در دمای 1273K و فشار 1MPa)

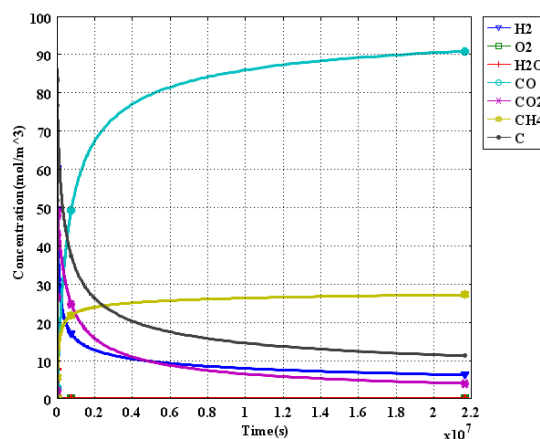
جدول ۱۴: مقدار و اجزای گاز تولیدی حاصل از یک کارگاه UCG در لایه K10 (در دمای 1273K و فشار 1MPa)

مقدار (میلیون متر مکعب)	گاز تولیدی
۲/۵۳۷	CO ₂
۱/۸۴۸	H ₂
۳/۴۲۰	CH ₄
۹/۶۴۸	CO
۱۷/۴۵۳	کل گاز تولیدی

راکتور طبیعی (حفره ایجاد شده در زیر زمین) می‌افتد. همچنین حجم اولیه یعنی حجم لینک اتصالی، ۱۶/۳۳ متر مکعب (۰/۱۲ × ۳/۱۴ × ۵۲۰) در نظر گرفته شده است.

۵-۳- شبیه‌سازی عددی

همه اطلاعاتی که در مرحله قبل محاسبه شد به همراه ۹ واکنش اصلی، سنتیک واکنش و ویژگی‌های عناصر شرکت کننده در واکنش، در ماژول شیمی نرم‌افزار COMSOL وارد شد. لازم به ذکر است که این مدل یک مدل بدون بُعد است و هدف از آن بررسی واکنش‌های شیمیایی برای تولید گاز با بیشترین ارزش حرارتی است. این کار با تغییر در پارامترهای عملیاتی قابل کنترل میسر شده است. پس از اجرای مدل در نرم‌افزار نتیجه به صورت نمودار شکل ۵ و جدول ۱۳ حاصل شده است.



شکل ۵: نمودار غلظت گازهای تولیدی پس از اجرای اولیه مدل (در دمای 1273K و فشار 1MPa)

جدول ۱۳: مقدار و اجزای گاز تولیدی پس از اجرای اولیه مدل (در دمای 1273K و فشار 1MPa)

مقدار (میلیون متر مکعب)	گاز تولیدی
۰/۴۷۹	CO ₂
۰/۷۴۴	H ₂
۳/۲۳۵	CH ₄
۱۰/۸۱۵	CO
۱۵/۲۷۳	کل گاز تولیدی

همان‌طور که در منحنی شکل ۵ مشاهده می‌شود، هنوز همه کربن موجود در پهنه تبدیل به گاز نشده است و به عبارتی ۱۷۹۱ متر مکعب از حجم زغالسنگ در پهنه بدون استفاده باقی‌مانده است. علت این پدیده این است که همه اکسیدان تزریقی در فاز ناهمگن (که موجب سوختن

۵-۴- محاسبه ارزش حرارتی گاز تولیدی

در دمای ۲۵ درجه سانتی‌گراد و فشار یک اتمسفر، ارزش حرارتی هیدروژن ۲۸۵/۸ کیلوژول بر مول (kJ/mol)، ارزش حرارتی منو اکسیدکربن ۲۸۳/۰ کیلوژول بر مول، ارزش حرارتی متان ۸۹۰/۸ کیلوژول بر مول و ارزش حرارتی کربن دی اکسید تقریباً صفر است [۲۶]. بنابراین برای محاسبه ارزش حرارتی کل گاز تولیدی حاصل از هر کارگاه استخراج UCG برای لایه K10 منطقه تخت، ابتدا مقدار مول اجزای گاز تولیدی با توجه به وزن مولکولی عناصر در جدول ۱۵ محاسبه شده است. سپس با توجه به ارزش حرارتی هر مول از گازهای تولیدی، نتایج محاسبات مربوطه برای به دست آوردن ارزش حرارتی کل گاز تولیدی به صورت جدول ۱۶ به دست آمده است.

جدول ۱۵: مقادیر گازهای تولیدی از هر کارگاه UCG در لایه

K10 منطقه تخت

مقدار (میلیون مول)	گاز تولیدی
۲۳۹/۷۰	CO ₂
۱۷۴/۶۰	H ₂
۳۲۳/۱۳	CH ₄
۹۱۱/۵۸	CO
۱۶۴۹/۰۴	کل گاز تولیدی

جدول ۱۶: ارزش حرارتی هر یک از گازهای تولیدی از یک

کارگاه UCG در لایه K10 منطقه تخت

پارامتر	مقدار (بر حسب میلیون)
ارزش حرارتی گاز هیدروژن (KJ)	۴۹۹۰۲/۹۶
ارزش حرارتی گاز منو اکسید کربن (KJ)	۲۵۷۹۷۹/۴۰
ارزش حرارتی گاز متان (KJ)	۲۸۷۸۵/۳۳
ارزش حرارتی گاز کربن دی اکسید (KJ)	۰
ارزش حرارتی کل گاز تولیدی (KJ)	۵۹۵۷۳۳/۷۰

۶- بحث

با توجه به محاسبات انجام شده در مراحل قبل، متر مکعب گاز تولیدی از هر پهنه در دمای ۲۵ درجه سانتی‌گراد و فشار ۱ اتمسفر، ارزش حرارتی گاز تولیدی و سایر نتایج مورد نظر از این شبه‌سازی به صورت جدول ۱۷ به دست آمده است.

طبق پژوهش جلالی و همکاران (۱۳۹۲) برای تامین خوراک یک نیروگاه برق ۲۷ مگاواتی سیکل ترکیبی گازی (IGCC)، در هر ساعت ۴۳۰۰۰ متر مکعب گاز لازم است. جدول ۱۷: نتایج اجرای مدل برای یک کارگاه UCG در لایه K10 منطقه تخت

پارامتر	مقدار
مقدار کل گاز تولیدی (kg)	۴۹۹۰/۲۹ × ۱۰ ^۷
ارزش حرارتی گاز سنتزی (Kcal/kg)	۵۹۶۴/۱۵
حجم گاز تولیدی (m ³)	۴/۰۴ × ۱۰ ^۷
نرخ گاز تولیدی (m ³ /h)	۵۱۰۹/۶۸
زمان کل عملیات (month)	۱۱

با توجه به نتایج به دست آمده از جدول ۱۷ از هر کارگاه UCG در منطقه تخت، ۵۱۰۹ متر مکعب بر ساعت گاز تولید می‌شود. بنابراین تعداد کارگاه فعال برای تامین حجم گاز مورد نیاز، به صورت رابطه ۲ محاسبه می‌شود.

$$NP = \frac{TG}{PG} \quad (2)$$

در این رابطه NP، TG و PG به ترتیب تعداد کارگاه فعال، نرخ کل گاز مورد نیاز و نرخ گاز تولیدی از یک کارگاه است.

در نهایت نتیجه این شد که برای تامین حجم گاز مورد نیاز (۴۳۰۰۰ مترمکعب بر ساعت) اگر پارامترهای عملیاتی مطابق جدول ۱۰ در نظر گرفته شود (به جز زمان عملیات که به ۱۱ ماه افزایش یافت)، در یک دوره ۱۱ ماهه باید هم‌زمان ۹ کارگاه استخراج فعال باشد. طبق الگوی طراحی شده، از هر کارگاه ۵۱۰۹ مترمکعب بر ساعت و از مجموع ۹ کارگاه، ۴۵۹۸۷ مترمکعب بر ساعت گاز سنتزی با ارزش حرارتی ۵۹۶۴ کیلوکالری بر کیلوگرم تولید می‌شود (پس از پایان ۱۱ ماه ۳۶۴۲۱۸۶۱۷ مترمکعب گاز سنتزی در دمای ۲۵ درجه سانتی‌گراد و فشار ۱ اتمسفر تولید می‌شود). همان‌طور که مشاهده می‌شود مقدار و ارزش حرارتی گاز تولیدی کمی بیشتر از مقدار مورد نیاز برآورد شده است. با توجه به این که در مدل ارائه شده در این پژوهش نشت گاز و سایر تلفات در نظر گرفته نشده است، این مقادیر اضافه به عنوان جبرانی برای این تلفات تلقی شده است. در ادامه با توجه به میزان کل ذخیره زغالسنگ در هر پهنه که ۳۸۱۹۲ تن برآورد شده است [۱۱] و میزان کل ذخیره لایه K10 که ۸۴۶۲۹۲۰ تن تخمین زده شده است (گزارش اکتشافی شرکت البرز شرقی، ۱۳۸۸)؛ طبق محاسبات انجام

اطلاعات مورد نیاز برای تست کامل مدل ارائه شده در این پژوهش برای یک پهنه استخراجی شامل تناژ زغاسنگ تبدیل شده به گاز، زمان کل عملیات، نرخ تزریق اکسیژن و بخار آب (مجموعه‌هایی که از هوا به عنوان اکسیدان استفاده شده است به دلیل تاثیر گاز نیتروژن بر فرآیند، در این مدل جواب نمی‌دهد)، فشار و دمای کاواک، مشخصات زغالسنگ (شامل چگالی، خاکستر، مواد فرار، رطوبت، کربن ثابت)، مشخصات مواد فرار (شامل کربن منواکسید، کربن دی اکسید، متان، سایر)، اجزا و مقدار گاز تولیدی، ارزش حرارتی گاز تولیدی، قطر چاه‌های تولید و تزریق و لینک اتصال و ابعاد پهنه و میزان نشت گاز از کاواک در طول زمان عملیات است. اگر همه این اطلاعات برای یک مجموعه واقعی UCG در دسترس باشد، می‌توان کارایی مدل ارائه شده در این مطالعه را به طور کامل تست کرد (با واقعیت مقایسه شود).

اگرچه در دسترس نبودن اطلاعات مورد نیاز باعث می‌شود که امکان تست کامل این مدل میسر نباشد، اما یکسان بودن نتایج به دست آمده از مدل ارائه شده در این مطالعه، با نتایج پژوهش‌های دیگر می‌تواند تایید کند که این مدل به واقعیت نزدیک است. مقایسه مهم‌ترین نتایج به دست آمده از این مدل با سایر مطالعات در جدول ۱۸ گردآوری شده است.

شده، لایه K10 می‌تواند خوراک یک نیروگاه برق ۲۷ مگاواتی سیکل ترکیبی گازی (IGCC) را به مدت ۲۲ سال تامین کند.

لازم به ذکر است که برای تولید حجم گاز مورد نیاز (۴۳۰۰۰ مترمکعب در ساعت با ارزش حرارتی ۵۰۰۰ کیلوکالری بر کیلوگرم)، طراحی انجام شده در این پژوهش فقط یکی از حالت‌های ممکن را نشان می‌دهد. یعنی می‌توان پارامترهای عملیاتی (در جدول ۱۰) را تغییر داد و با اجرای مدل و محاسبات مربوطه، نتایج و طراحی دیگری را نیز انجام داد تا مقدار گاز مورد نیاز تامین شود.

۷- اعتبارسنجی مقدماتی

برای اعتبارسنجی مدل ارائه شده در این پژوهش، به دلیل جامع بودن این مدل به حجم اطلاعات زیادی از یک میدان واقعی UCG برای شبیه‌سازی فرآیند نیاز است. اما همه این اطلاعات از یک مجموعه واقعی UCG یا در دسترس عموم نیستند و یا در انحصار برخی شرکت‌های اجرا کننده فرآیند UCG است. توضیح اینکه حتی اگر فقط یک پارامتر از میدان واقعی UCG هم در دسترس نباشد، با کم و زیاد کردن مقدار این پارامتر مجهول در مدل، می‌توان به نتایج دلخواه رسید؛ اما این کار نمی‌تواند اعتبار مدل را تایید کند.

جدول ۱۸: مقایسه نتایج به دست آمده از مدل ارائه شده در این مطالعه با سایر پژوهش‌ها

ردیف	نتیجه در این مطالعه	ارجاع به سایر پژوهش‌ها
۱	با افزایش زمان عملیات، ارزش حرارتی گاز تولیدی افزایش می‌یابد.	[27]
۲	با افزایش نرخ تزریق بخار آب، نرخ تولید هیدروژن افزایش می‌یابد.	[16]
۳	با افزایش نرخ تزریق اکسیدان مقدار زغالسنگ تبدیل به گاز شده و در نتیجه حجم کاواک افزایش می‌یابد.	[7]
۴	افزایش فشار گاز درون کاواک موجب افزایش میزان گسترش فضای استخراجی (حجم کاواک) می‌شود.	[5]
۵	با افزایش مواد فرار موجود در زغالسنگ، نرخ رشد فضای استخراجی افزایش می‌یابد.	[13]
۶	با افزایش خاکستر زغال سنگ، نرخ رشد فضای استخراجی افزایش می‌یابد.	[5, 28]
۷	با افزایش نرخ تزریق اکسیدان، ارزش حرارتی گاز تولیدی کاهش می‌یابد.	[7]
۸	ارزش حرارتی به دست آمده در این مدل برای مقیاس تجاری ۵۹۰۰ کیلوکالری بر کیلوگرم به دست آمد. در میداین واقعی UCG هم ارزش حرارتی در همین حدود می‌باشد (حدود ۴۰۰۰ تا ۶۰۰۰ کیلوکالری بر کیلوگرم).	[4, 5]
۹	با افزایش زمان عملیات، حجم کاواک افزایش می‌یابد.	[14]
۱۰	با افزایش دما، تولید گاز CH ₄ کم می‌شود.	[18]

۸- نتیجه‌گیری

این پژوهش، با نتایج سایر مطالعات نشان داد که این مدل به واقعیت نزدیک است.

مراجع

- [1] Robert, F., & Joseph, W. (1996). In situ gasification and combustion of coal. H.Hartman, SME Handbook. Inc. Littleton Colorado. Society for Mining, Metallurgy and Exploration.
- [2] Najafi, M. (2014). Thermo-mechanical modeling of panel dimentions in underground coal gasification. PhD thesis. Shahrood University of technology (in persian).
- [3] www.lincenergy.com
- [4] Couch, G. R. (2009). Underground Coal Gasification. IEA Clean Coal Centre, <http://www.iea-coal.org.uk>.
- [5] Perkins, G. M. P. (2005). Mathematical modelling of underground coal gasification (p. 257). University of New South Wales.
- [6] Nourozieh, H., Kariznovi, M., Chen, Z., & Abedi, J. (2010). Simulation study of underground coal gasification in Alberta reservoirs: geological structure and process modeling. *Energy & Fuels*, 24(6), 3540-3550.
- [7] Sarraf Shirazi, A. (2012). CFD Simulation of underground coal gasification. In *Masters Abstracts International* (Vol. 51, No. 03).
- [8] Daggupati, S., Mandapati, R. N., Mahajani, S. M., Ganesh, A., Mathur, D. K., Sharma, R. K., & Aghalayam, P. (2010). Laboratory studies on combustion cavity growth in lignite coal blocks in the context of underground coal gasification. *Energy*, 35(6), 2374-2386.
- [9] Moosavi, M. (2012). Stability analysis untherground coal gasification cavity in Takht coal region of estrn Alborz. Thesis submitted for the degree of M.Sc. Yazd University (in persian).
- [10] Lotfi Azad, A. (2012). Gas seepage modeling and analysis of Underground Coal Gasification (UCG) reactors; Case Study: Tabas coal mine. Thesis submitted for the degree of M.Sc. Shahrood University of technology (in persian).
- [11] Jalali, S. M. E., Najafi, M., & KhaloKakaie, R. (2013). Pre-feasibility usage of underground coal gasification (UCG) for power generation; Case study: Takht coal region. *Journal of Mining Engineering*, No. 19 (in persian).
- [12] Najafi, M., Jalali, S. M. E., KhaloKakaie, R., & Forouhandeh, F. (2015). Prediction of cavity growth rate during underground coal gasification using multiple regression analysis. *International*

پیش‌بینی مقدار و ارزش حرارتی گاز تولیدی پیش از اجرای فرآیند UCG برای انجام تحلیل‌های اقتصادی ضروری است. در این تحقیق یک مدل عددی در نرم‌افزار COMSOL توسعه داده شده است. در مدل ارائه شده می‌توان تاثیر پارامترهای عملیاتی بر ترکیب و ارزش حرارتی گاز تولیدی را پیش از اجرای فرآیند UCG در مقیاس تجاری، پیش‌بینی نمود. مدل ارائه شده در این پژوهش با یک مثال عددی برای گازی کردن لایه K10 منطقه تخت معرفی شده است. طبق گزارش‌های موجود برای تامین خوراک یک نیروگاه برق ۲۷ مگاواتی سیکل ترکیبی گازی (IGCC) باید در هر ساعت ۴۳۰۰۰ متر مکعب گاز سنتزی با ارزش حرارتی ۵۰۰۰ کیلوکالری بر کیلوگرم تولید شود. در مطالعه حاضر مقدار هر یک از پارامترهای عملیاتی برای تولید این حجم گاز، تعیین شده است (لازم به ذکر است که این طراحی فقط یکی از حالت‌های ممکن را برای تامین مقدار گاز مورد نیاز نشان می‌دهد). در نهایت نتیجه این شد که برای تامین حجم گاز مورد نیاز (۴۳۰۰۰ متر مکعب بر ساعت) در منطقه تخت اولاً باید پارامترهای عملیاتی مطابق آنچه که به دست آمد در نظر گرفته شود، ثانیاً باید ۹ کارگاه هم‌زمان با هم فعال باشند. در این صورت با توجه به محاسبات انجام شده، لایه K10 می‌تواند خوراک یک نیروگاه برق ۲۷ مگاواتی سیکل ترکیبی گازی (IGCC) را به مدت ۲۲ سال تامین کند. در مدل ارائه شده در این پژوهش امکان تحلیل حساسیت برای هر یک از پارامترهای عملیاتی وجود دارد. برای انتخاب مقدار هر یک از این پارامترها علاوه بر این که مقدار آنها باید در حد معقول و منطقی باشد، باید به تجهیزات در دسترس برای اجرای عملیات نیز توجه شود. در هر صورت با انتخاب هر مقداری برای هر یک از پارامترهای عملیاتی، با اجرای این مدل پیش از اجرای فرآیند UCG در مقیاس بزرگ، می‌توان نتایج کار (ترکیب، مقدار و ارزش حرارتی گاز تولیدی) را مشاهده و ارزیابی کرد. در نهایت اگر چه در دسترس نبودن اطلاعات مورد نیاز باعث شد که امکان تست کامل این مدل میسر نباشد، اما یکسان بودن نتایج به دست آمده از مدل ارائه شده در

- [25] www.bitumen.loxblog.com/post/191
- [26] Haynes, W. M. (Ed.). (2014). CRC handbook of chemistry and physics. CRC press.
- [27] Daggupati, S., Mandapati, R. N., Mahajani, S. M., Ganesh, A., Pal, A. K., Sharma, R. K., & Aghalayam, P. (2011). Compartment modeling for flow characterization of underground coal gasification cavity. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 50(1), 277-290.
- [28] Prabu, V., & Jayanti, S. (2011). Simulation of cavity formation in underground coal gasification using bore hole combustion experiments. *Energy*, 36(10), 5854-5864.
- [13] Perkins, G., & Sahajwalla, V. (2008). Steady-state model for estimating gas production from underground coal gasification. *Energy & Fuels*, 22(6), 3902-3914.
- [14] Daggupati, S., Mandapati, R. N., Mahajani, S. M., Ganesh, A., Sapru, R. K., Sharma, R. K., & Aghalayam, P. (2011). Laboratory studies on cavity growth and product gas composition in the context of underground coal gasification. *Energy*, 36(3), 1776-1784.
- [15] Andrianopoulos, E., Korre, A., & Durucan, S. (2015). Chemical process modelling of underground coal gasification and evaluation of produced gas quality for end use. *Energy Procedia*, 76, 444-453.
- [16] Żogała, A., & Janoszek, T. (2015). CFD simulations of influence of steam in gasification agent on parameters of UCG process. *Journal of Sustainable Mining*, 14(1), 2-11.
- [17] Laciak, M., Kostúr, K., Durdán, M., Kačur, J., & Flegner, P. (2016). The analysis of the underground coal gasification in experimental equipment. *Energy*, 114, 332-343.
- [18] Wiatowski, M., Kapusta, K., Ludwik-Pardała, M., & Stańczyk, K. (2016). Ex-situ experimental simulation of hard coal underground gasification at elevated pressure. *Fuel*, 184, 401-408.
- [19] Shayan-Mehr, M., Ghaemi, A., & Nazari, M. (2014). Chemical reaction engineering using Comsol Multiphysics software. Andishehsara Publishing (in persian).
- [20] Roohollah, A., Jalili, S., Samii, D. M., & Arshadi, N. (2016). Chemistry 3 and Lab. Printing and Publishing Company of Iran Textbooks, Fourteenth Edition (in persian).
- [21] Exploration report of East Alborz Co. (2009). Report of the end of exploration of Thakht coal region. Iran Mineral Processing and Production Company, East Alborz Coal Company, Shahroud (in persian).
- [22] www.earth.google.com
- [23] Hossieni, M. (2007). Determination of the Ability of Mechanization of Coal Layers Using Fuzzy Logic, Case Study: Takht Coal Mine. Thesis submitted for the degree of M.Sc. Shahrood University of technology (in persian).
- [24] Yazdi, M. (2009). Coal (From origin to invironmental impacts). Publication of JIHAD AMIRKABIR University (in persian).

-
- 1- Controlled Retraction Injection Point
 2- Bloodwood Creek
 3- Linc Energy
 4- Cavity
 5- Computational Fluid Dynamics
 6- Integrated Gasification Combined Cycle
 7- Semibatch