

## Abstract

Entrained flow coal reactors can process higher mass throughputs and generate greater char conversions compared to their fluidized- and fixed-bed counterparts. The entrained flow reactor is an integral part of the Integrated Gasification Combined Cycle and Pressurized Oxy-Coal Combustion plants with carbon capture and sequestration, which are promising technologies to mitigate the levels of  $CO_2$  emissions into the atmosphere. The flow inside an entrained flow reactor is highly turbulent, coupled, multiphase and reacting. Consequently, even after several years of investigations, there are many gaps in our understanding of the physico-chemical processes occurring in these reactors that need to be resolved for selecting the optimal operating conditions. However, conducting experiments across the relevant range of operating conditions in such reactors would be uneconomical. Therefore, in the present thesis, CFD modelling is undertaken for investigating the lab-scale and pilot-scale entrained flow coal reactors.

Firstly, an appropriate turbulence model is investigated to simulate the multiphase reacting flow inside the single swirl burner (SSB) entrained flow Pusan University 16 KWth lab-scale furnace. The furnace is cofired using pulverized bituminous coal and liquified petroleum gas and is operated in both un-staged and air-staged conditions. The investigation shows that the shear stress transport (SST)  $k-\omega$  model and its variant with low-Re correction predict the profiles of temperature and species concentrations reasonably well, but significantly underpredict the temperature in the furnace core at axial locations away from the burner. On the other hand, the Transition SST  $k-\omega$  model provides better overall congruency with the measured temperature and species concentrations when compared with the other used turbulence models. Therefore, using the Transition SST  $k-\omega$  turbulence model, a comprehensive model is developed for the SSB furnace, which is further used to investigate the effect of coal particle size on the central recirculation zone (CRZ) formed inside the reactor. It is observed that a decrease of nearly 50% in the coal sample size results in an increase of the CRZ length by 82.6% in the investigated reactor.

Next, a computational model is developed to simulate reacting environment inside the pilot-scale, tangentially-fired, Mitsubishi Heavy Industry entrained-flow coal gasifier. Using this comprehensive model, the impact of three operating parameters, namely, swirl number (SN), reactor pressure and mass throughput on the gasifier flow field and coal gasification process is investigated. It is demonstrated that for given values of any two of these parameters, it requires a threshold value of the third parameter to form the CRZ, the absence of which lowers char conversion. Therefore, a modified SN incorporating the combined effect of conventional SN, reactor pressure and mass throughput on the onset of CRZ formation is proposed as a general CRZ formation criterion for tangentially-fired gasifiers. Furthermore, the impact of variation in reactor pressure and mass throughput on char conversion is shown to be mediated through the corresponding change in particle residence time and pressure effect on kinetics. The results demonstrate that the operating parameters interact in a complex state space that governs the gasifier flow physics and optimal operation.

In addition to these operating parameters, the effect of pulverized coal particle size on the two-phase flow field of the Mitsubishi Heavy Industry gasifier is investigated. It is observed that the length of CRZ formed in the gasifier flow increases with the mean size of the injected coal particles. The CRZ lengths are 5.6, 4.5 & 2.1 m, respectively, for the cases with particle size distributions (PSDs) having mass mean diameters of 80, 40 & 20  $\mu\text{m}$ . The generic swirl number,  $SN_g$ , captures this impact of particle size on the flow field. The  $SN_g$  monotonically decays along the flow and the CRZ across all the investigated cases in tangentially-fired gasifier terminates at an axial location where this SN drops to a value in the range of 0.10-0.12.

To conclude, the present work yields substantial insights on the impact of operating conditions on the two-phase flow field inside entrained flow coal reactors. Broader parametric studies on a range of reactor designs and operating conditions would be required for generalization of these insights.

## सारांश

द्रवित- और फिक्स्ड-बेड समकक्षों की तुलना में एंट्रेंड फ्लो कोयला रिएक्टर उच्च द्रव्यमान थ्रूपुट को संसाधित तथा अधिक चार रूपांतरण उत्पन्न कर सकते हैं। एंट्रेंड फ्लो रिएक्टर कार्बन कैप्चर और सीक्वेंस्ट्रेशन के साथ एकीकृत गैसीकरण संयुक्त चक्र और दबावयुक्त ऑक्सी-कोयला दहन संयंत्रों का एक अभिन्न अंग है, जो वातावरण में  $\text{CO}_2$  उत्सर्जन के स्तर को कम करने के लिए आशाजनक प्रौद्योगिकियां हैं। एक एंट्रेंड फ्लो रिएक्टर के अंदर का प्रवाह अत्यधिक अशांत, युग्मित, मल्टीफ़ेज़ और प्रतिक्रियाशील होता है। नतीजतन, कई वर्षों की जांच के बाद भी, इन रिएक्टरों में होने वाली भौतिक-रासायनिक प्रक्रियाओं की हमारी समझ में कई अंतराल हैं जिन्हें इष्टतम परिचालन स्थितियों के चयन के लिए हल करने की आवश्यकता है। हालांकि, ऐसे रिएक्टरों में परिचालन स्थितियों की प्रासंगिक सीमा में प्रयोग करना अलाभकारी होगा। इसलिए, वर्तमान थीसिस में, लैब-स्केल और पायलट-स्केल एंट्रेंड फ्लो रिएक्टरों की जांच के लिए सीएफडी मॉडलिंग की जाती है।

सबसे पहले, एक उपयुक्त अशांति मॉडल की जांच सिंगल जुल्फ़ बर्नर (एसएसबी) एंट्रेंड फ्लो पुसान यूनिवर्सिटी 16 KWth लैब-स्केल फर्नेस के अंदर मल्टीफ़ेज़ रिएक्टिंग फ्लो को अनुकरण करने के लिए की जाती है। भट्टी को चूर्णित बिटुमिनस कोयले और तरल पेट्रोलियम गैस का उपयोग करके सह-फायर किया जाता है और इसे बिना स्टेज और एयर-स्टेज दोनों स्थितियों में संचालित किया जाता है। जांच से पता चलता है कि शीयर स्टेस ट्रांसपोर्ट (एसएसटी)  $k-\omega$  मॉडल और लो- $Re$  करेक्शन वाला इसका वैरिएंट तापमान और प्रजातियों की सांद्रता के प्रोफाइल की भविष्यवाणी काफी अच्छी तरह से करते हैं, लेकिन दूर अक्षीय स्थानों पर फर्नेस कोर में तापमान को काफी कम कर देते हैं। बर्नर। दूसरी ओर, ट्रांज़िशन एसएसटी  $k-\omega$  मॉडल इस्तेमाल किए गए अन्य अशांति मॉडलों की तुलना में मापा तापमान और प्रजातियों की सांद्रता के साथ बेहतर समग्र अनुरूपता प्रदान करता है। इसलिए, ट्रांज़िशन एसएसटी  $k-\omega$  टर्बुलेंस मॉडल का उपयोग करते हुए, एसएसबी फर्नेस के लिए एक व्यापक मॉडल विकसित किया गया है, जिसका उपयोग रिएक्टर के अंदर बने केंद्रीय रीसर्क्युलेशन ज़ोन (सीआरजेड) पर कोयले के कण आकार के प्रभाव की जांच के लिए किया जाता है। यह देखा गया है कि जांच किए गए रिएक्टर में कोयले के नमूने के आकार में लगभग 50% की कमी के परिणामस्वरूप सीआरजेड की लंबाई में 82.6% की वृद्धि हुई है।

इसके बाद, पायलट-स्केल, स्पशरिखा से निकाल दिया गया, मित्सुबिशी हेवी इंडस्ट्री एंट्रेंड-फ्लो कोल गैसीफायर के अंदर प्रतिक्रियाशील वातावरण का अनुकरण करने के लिए एक कम्प्यूटेशनल मॉडल विकसित किया गया है। इस व्यापक मॉडल का उपयोग करते हुए, तीन ऑपरेटिंग मापदंडों, अर्थात् भंवर संख्या (एसएन), रिएक्टर दबाव और द्रव्यमान थ्रूपुट के प्रभाव की गैसीफायर प्रवाह क्षेत्र और कोयला गैसीकरण प्रक्रिया पर जांच की जाती है। यह प्रदर्शित किया जाता है कि इनमें से किन्हीं

दो मापदंडों के दिए गए मानों के लिए, सीआरजेड बनाने के लिए तीसरे पैरामीटर के थ्रेशोल्ड मान की आवश्यकता होती है, जिसके अभाव में चार रूपांतरण कम हो जाते हैं। इसलिए, सीआरजेड गठन की शुरुआत पर पारंपरिक एसएन, रिएक्टर दबाव और मास थ्रूपुट के संयुक्त प्रभाव को शामिल करते हुए एक संशोधित एसएन को स्पर्शरिखा से निकाले गए गैसीफायर के लिए एक सामान्य सीआरजेड गठन मानदंड के रूप में प्रस्तावित किया जाता है। इसके अलावा, चार रूपांतरण पर रिएक्टर दबाव और द्रव्यमान थ्रूपुट में भिन्नता के प्रभाव को कण निवास समय में संबंधित परिवर्तन और कैनेटीक्स पर दबाव प्रभाव के माध्यम से मध्यस्थता के लिए दिखाया गया है। परिणाम प्रदर्शित करते हैं कि ऑपरेटिंग पैरामीटर एक जटिल राज्य स्थान में बातचीत करते हैं जो गैसीफायर प्रवाह भौतिकी और इष्टतम संचालन को नियंत्रित करता है।

इन ऑपरेटिंग मापदंडों के अलावा, मित्सुबिशी हेवी इंडस्ट्री गैसीफायर के दो-चरण प्रवाह क्षेत्र पर चूर्णित कोयला कण आकार के प्रभाव की जांच की जाती है। यह देखा गया है कि गैसीफायर के प्रवाह में बनने वाले सीआरजेड की लंबाई इंजेक्शन चूर्णित कोयले के कणों के औसत आकार के साथ बढ़ जाती है। 80, 40 और 20  $\mu\text{m}$  औसत द्रव्यमान व्यास के कण आकार वितरण (पीएसडी) वाले मामलों के लिए केंद्रीय पुनरावर्तन क्षेत्रों की लंबाई क्रमशः 5.6, 4.5 और 2.1 मीटर है। कण आकार के इस प्रभाव को पकड़ने में सक्षम एक संशोधित भंवर संख्या इस थीसिस में प्रस्तावित है। यह संशोधित एसएन नीरस रूप से प्रवाह के साथ क्षय होता है और स्पर्शरिखा से निकाले गए गैसीफायर में सभी जांच किए गए मामलों में सीआरजेड एक अक्षीय स्थान पर समाप्त होता है जहां यह नया एसएन 1.1-1.2 की सीमा में एक मूल्य पर गिरता है।

निष्कर्ष निकालने के लिए, वर्तमान कार्य एंट्रेंड फ्लो कोयला रिएक्टरों के अंदर दो-चरण प्रवाह क्षेत्र पर परिचालन स्थितियों के प्रभाव पर पर्याप्त अंतर्दृष्टि प्रदान करता है। इन अंतर्दृष्टि के सामान्यीकरण के लिए रिएक्टर डिजाइन और परिचालन स्थितियों की एक श्रृंखला पर व्यापक पैरामीट्रिक अध्ययन की आवश्यकता होगी।