

مدل سازی ترمودینامیکی و ارزیابی عملکرد یک سیستم انرژی تولید هیدروژن پاک با استفاده از غشای جداساز پالادیومی با روش کمینه سازی انرژی آزاد گیبس و ضرایب نامعین لاگرانژ

پریسا مجاور

استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی کرمانشاه، کرمانشاه، ایران

پست الکترونیکی نویسنده مسئول:

p.mojaver@kut.ac.ir

چکیده:

در این پژوهش یک سیستم یکپارچه برای تولید هیدروژن پاک از زیست توده اکالیپتوس طراحی و بررسی شده است. این سیستم راکتور گازی سازی، راکتور اصلاح بخار-متان، راکتور جابجایی آب-گاز و غشای پالادیومی برای جداسازی هیدروژن است. ترکیب این فرآیندها امکان افزایش سهم هیدروژن در گاز سنتز و کاهش آلاینده ها را فراهم می سازد. معادلات حاکم در نرم افزار حلگر معادلات مهندسی پیاده سازی و حل شده و نتایج حاصل استخراج گردید. روش کار بر مبنای شبیه سازی ترمودینامیکی بوده و اعتبارسنجی نتایج با داده های تجربی موجود در ادبیات انجام شده است که تطابق خوبی را نشان می دهد. یافته ها حاکی از آن است که دمای گازی سازی نقش تعیین کننده ای در ترکیب گاز تولیدی دارد؛ به طوری که با افزایش دما، سهم هیدروژن در خروجی راکتور گازساز به میزان ۱۵/۲۶ درصد و در راکتور اصلاح بخار-متان به میزان ۲۰/۷۱ درصد افزایش یافته، در حالی که این مقدار در راکتور جابجایی آب-گاز ۲/۱۲ درصد کاهش نشان می دهد. همچنین، افزایش دما موجب افزایش شار عبوری هیدروژن از غشای پالادیومی از مقدار ۰/۲۹ به ۱/۵۲ ژول بر مترمربع ثانیه شده است.

واژگان کلیدی:

کمینه سازی انرژی آزاد گیبس، ضرایب نامعین لاگرانژ، هیدروژن پاک، جابجایی آب-گاز، غشای جداساز پالادیومی

Thermodynamic Modeling and Performance Assessment of a Clean Hydrogen Production Energy System Using a Palladium Separation Membrane Based on Gibbs Free Energy Minimization and Lagrange Undetermined Multipliers Method

Parisa Mojaver *

Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, Kermanshah University of Technology, Kermanshah, Iran

[*p.mojaver@kut.ac.ir](mailto:p.mojaver@kut.ac.ir)

Abstract:

In light of the depletion of fossil fuel resources and growing environmental concerns caused by greenhouse gas emissions, the utilization of renewable energy sources, particularly biomass, has garnered increasing attention. This study presents an innovative system for clean energy production using eucalyptus biomass. The proposed system consists of four main components: a gasification reactor, a steam methane reforming reactor, a water-gas shift reactor, and a palladium membrane for hydrogen purification. Thermodynamic modeling and simulation of the system components were conducted using Engineering Equation Solver software, with a particular focus on the effects of process temperature on system performance. The results indicate that increasing the temperature of the gasification reactor from 800 to 1000 K significantly influences the composition of the syngas. The hydrogen content increases from 32.3% to 40.7%, while carbon monoxide content rises from 9.9% to 18.8%. In the steam methane reforming reactor, elevated temperature improves reforming efficiency, reducing the carbon dioxide concentration in the product gas by 4.1%. On the other hand, in the water-gas shift reactor, higher temperature leads to a slight decrease in hydrogen conversion from 61.3% to 60.0%, accompanied by an increase in carbon dioxide content from 10.2% to 12.1%. These findings emphasize the critical role of temperature in directing the equilibrium and reaction kinetics within each subsystem. The hydrogen flux through the palladium membrane shows a substantial enhancement with temperature rise, improving from 0.29 to 1.02 J/m².s. This reflects the superior performance of palladium membranes at higher temperatures for separating and purifying hydrogen from the gas mixture. The use of eucalyptus biomass as a renewable and widely available feedstock, coupled with advanced hydrogen production and purification technologies, presents a promising approach to addressing energy and environmental challenges. The insights gained from this study highlight the potential for improving overall system efficiency and hydrogen yield through careful thermal management across each reactor unit.

Keywords: Gibbs free energy minimization, Lagrange undetermined multipliers, Clean hydrogen, Water-gas shift reactor, Palladium separation membrane

علائم و اختصارات

E_a	انرژی فعال سازی (J)
E_{inj}	مقدار ورودی هر جزء در مخلوط خوراک (mol)
G	انرژی آزاد گیبس (J)
J_H	شار هیدروژن ($J/m^2.s$)
P_e	نفوذپذیری هیدروژن ($mol/m.s.Pa^{1/2}$)
P_{e^0}	حداکثر نفوذپذیری هیدروژن ($mol/m.s.Pa^{1/2}$)
P_f	فشار در سمت تغذیه (Pa)
P_p	فشار در سمت نفوذ (Pa)
$\bar{R}$	ثابت جهانی گاز ($kJ/kg.K$)
T	دما (K)
x	فاصله (m)
α	نسبت هیدروژن به کربن (mol/mol)
β	نسبت اکسیژن به کربن (mol/mol)
γ	مول ورودی بخار آب در راکتور گازی سازی (mol)
δ	مول اجزای گاز تولیدی راکتور گازی سازی (mol)
ε	مول ورودی بخار آب در راکتور اصلاح بخار-متان (mol)
κ	مول ورودی بخار آب در راکتور جابجایی آب-گاز (mol)
λ	تابع اجزا
μ	پتانسیل شیمیایی (J/mol)
ν	مقادیر مولی اجزا (mol)
ξ	ضریب لاگرانژ (-)
τ	مول اجزای گاز تولیدی راکتور جابجایی آب-گاز (mol)
φ	مول اجزای گاز تولیدی راکتور اصلاح بخار-متان (mol)

۱- مقدمه و تاریخچه تحقیقات

در سال‌های اخیر، رشد فزاینده جمعیت جهانی و توسعه شتابان صنایع منجر به افزایش قابل توجه تقاضای انرژی شده است. همزمان، محدودیت منابع سوخت‌های فسیلی و پیامدهای منفی زیست محیطی ناشی از مصرف آن‌ها، نگرانی‌های جدی را در سطح جهانی ایجاد کرده است [۱]. سوزاندن سوخت‌های فسیلی باعث انتشار گازهای گلخانه‌ای می‌شود که از عوامل اصلی تغییرات اقلیمی و گرمایش زمین به شمار می‌روند. در نتیجه، توجه به طراحی و توسعه سیستم‌های انرژی پاک و پایدار بیش از پیش مورد تأکید قرار گرفته

است [۲]. نقش کلیدی سیستم‌های انرژی پاک در تأمین انرژی پایدار و کاهش اثرات مخرب زیست محیطی، آن‌ها را به یکی از ارکان اساسی حرکت به سوی آینده‌ای پایدار و قابل زیست تبدیل کرده است [۳]. زیست توده به‌عنوان یکی از مهم‌ترین منابع تجدیدپذیر انرژی، جایگاه ویژه‌ای در تأمین انرژی پایدار دارد. این منبع شامل مواد آلی طبیعی نظیر چوب، پسماندهای کشاورزی و ضایعات جنگلی است که قابلیت تبدیل به انرژی را دارا هستند [۴]. به دلیل تجدیدپذیری و دسترسی گسترده زیست توده در نقاط مختلف جهان، بهره‌گیری از آن راهکاری مؤثر برای کاهش وابستگی به سوخت‌های فسیلی و محدودسازی انتشار گازهای گلخانه‌ای محسوب می‌شود. گازی‌سازی زیست‌توده یکی از روش‌های کارآمد تبدیل این منبع به انرژی است که در آن، زیست توده در دماهای بالا و در حضور عوامل گازی‌ساز نظیر بخار آب به گاز سنتز تبدیل می‌شود [۵]. گاز سنتز حاصل عمدتاً شامل هیدروژن، منواکسیدکربن، دی‌اکسیدکربن و متان است و می‌تواند به‌عنوان سوخت در انواع سیستم‌های تولید توان مورد استفاده قرار گیرد. توسعه سیستم‌های انرژی مبتنی بر زیست توده و گازی‌سازی، علاوه بر کاهش آلاینده‌های زیست‌محیطی، موجب استفاده بهینه از منابع طبیعی و کاهش ضایعات آلی می‌شود [۶]. افزون بر این، چنین سیستم‌هایی قابلیت استقرار در مناطق روستایی و دورافتاده را داشته و می‌توانند به‌عنوان منبعی مستقل و پایدار برای تأمین انرژی، نقش مؤثری در ارتقای کیفیت زندگی و تحقق توسعه پایدار ایفا کنند. این مزایا اهمیت زیست‌توده و فناوری گازی‌سازی آن را در مسیر تولید انرژی پاک و پایدار بیش از پیش نمایان می‌سازد [۷]. به‌کارگیری غشاهای جداساز پالادیومی در سیستم‌های انرژی مبتنی بر گازی‌سازی، نقش اساسی در جداسازی و خالص‌سازی هیدروژن از گاز سنتز ایفا می‌کند. این غشاها به دلیل خواص منحصر به فرد خود، از جمله نفوذپذیری بسیار بالا نسبت به هیدروژن و پایداری مناسب در دماهای بالا و محیط‌های خورنده، قادر به تفکیک مؤثر هیدروژن از سایر اجزای گاز سنتز نظیر منواکسیدکربن، دی‌اکسیدکربن و بخار آب هستند [۸ و ۹]. استخراج هیدروژن با خلوص بالا از گاز سنتز، تأثیر مستقیمی بر افزایش بازده سیستم‌های انرژی دارد. هیدروژن به‌عنوان یک حامل انرژی پاک و کارآمد، کاربردهای گسترده‌ای در بخش‌های صنعتی و حمل و نقل دارد و استفاده از آن به دلیل عدم تولید گازهای گلخانه‌ای، به کاهش اثرات

زیست محیطی کمک شایانی می‌کند [۱۰]. علاوه بر این، هیدروژن می‌تواند نقش مهمی در ذخیره‌سازی انرژی‌های تجدیدپذیر ایفا کرده و پایداری و قابلیت اطمینان سیستم‌های انرژی را افزایش دهد.

مطالعات گذشته نشان می‌دهند که گازی‌سازی زیست‌توده می‌تواند هم کیفیت سوخت را بهبود دهد و هم اثرات زیست‌محیطی را کاهش دهد. به‌عنوان مثال، وندرا^۱ و همکاران (۲۰۲۵) [۱۱] کاهش قابل توجه اثرات زیست‌محیطی و بهبود کیفیت سوخت را با گازی‌سازی زیست‌توده نشان دادند، در حالی که ننادگانی^۲ و ساندن^۳ (۲۰۲۳) [۱۲] اهمیت تحلیل ترمودینامیکی را برای بهینه‌سازی عملکرد ترمودینامیکی مورد تأکید قرار دادند. بر اساس این مطالعات، ین^۴ و همکاران (۲۰۲۵) [۱۳] یک سیستم ترکیبی سرمایش، گرمایش و توان را پیشنهاد کردند که گازی‌سازی همزمان زیست‌توده، پیل‌های سوختی اکسید جامد و چرخه‌های برایتون را ادغام می‌کند و بازده انرژی آن تا ۲۰/۹۳ درصد افزایش می‌یابد.

در زمینه مدل‌سازی و شبیه‌سازی گازی‌سازی، بیانسینی^۵ و همکاران (۲۰۲۳) [۱۴] یک مدل گازساز بستر سیال برای گازی‌سازی هوایی زباله‌های شهری در اسپن پلاس^۶ توسعه دادند و توانستند ارزش حرارتی پایین گاز سنتز را در بازه $4/2-7/3 \text{ MJ/Nm}^3$ پیش‌بینی کنند. جادون^۷ و همکاران (۲۰۲۵) [۱۵] نیز سه رویکرد مدل‌سازی ترمودینامیکی و سینتیکی را برای گازی‌سازی زیست‌توده چوبی مقایسه کرده و با داده‌های تجربی اعتبارسنجی نمودند تا انتخاب مدل مناسب برای شبیه‌سازی دقیق فرآیندها را تسهیل کنند. فخیم قنبرزاده و همکاران (۲۰۱۱) [۱۶] در پژوهشی به بررسی پتانسیل استفاده از ضایعات زیست‌توده‌ای به‌عنوان منبعی تجدیدپذیر برای تولید انرژی پرداختند. در این مطالعه، فرآیند گازی‌سازی زیست‌توده در حضور هوا و رطوبت به‌منظور تولید گاز تمیز و قابل احتراق مورد توجه قرار گرفت و گازساز بستر سیال به‌عنوان یکی از روش‌های کارآمد گازی‌سازی انتخاب شد.

فرجی و سعیدی (۲۰۲۲) [۱۷] با توسعه یک مدل سه مرحله‌ای شامل خشک‌کردن، پیرولیز و گازی‌سازی، شرایط بهینه برای تولید

گاز سنتز غنی از هیدروژن از پوسته بادام‌زمینی را شناسایی کردند. همچنین، سوپارمین^۸ و همکاران (۲۰۲۴) [۱۸] با انجام متاآنالیز، تأثیر پارامترهایی مانند ویژگی‌های زیست‌توده، نوع راکتور، عامل گازی‌کننده و نسبت‌های عملیاتی بر بازده گاز سنتز را بررسی کردند و نشان دادند که نتایج می‌تواند بسته به شرایط، روندهای ماکزیمم یا مینیمم داشته باشد. صفری ثابت و همکاران (۲۰۲۰) [۱۹] یک سیستم نوین الکترولیز بخار در دمای بالا با هسته اصلی چرخه برایتون یکپارچه با انرژی خورشیدی برای تولید هیدروژن پیشنهاد و به صورت عددی شبیه‌سازی شده است. به منظور ارزیابی دقیق عملکرد سیستم، تحلیل‌های انرژی و انرژی انجام شده و برای افزایش بازده کلی، از چرخه‌های رانکین و رانکین آلی در کنار هسته اصلی استفاده گردیده است.

این پژوهش با تمرکز بر استفاده از زیست‌توده اکالیپتوس برای تولید هیدروژن پاک و انرژی پایدار، مجموعه‌ای از نوآوری‌های مهم در حوزه انرژی ارائه می‌دهد. نخست، بهره‌گیری از زیست‌توده فراوان، تجدیدپذیر و کم هزینه مانند اکالیپتوس، جایگزینی مؤثر برای سوخت‌های فسیلی محدود و آلاینده به شمار می‌رود. دوم، طراحی یک سیستم یکپارچه مبتنی بر فناوری‌های پیشرفته شامل راکتور گازی‌سازی، راکتور اصلاح بخار-متان، راکتور جابجایی آب-گاز و غشای جداسازی پالادیوم، امکان تولید هیدروژن با خلوص بالا و کارایی انرژی قابل توجه را فراهم می‌کند. یکی از جنبه‌های نوآورانه این تحقیق، ترکیب فرآیندهای ترمودینامیکی و غشایی برای افزایش درصد هیدروژن در گاز سنتز است؛ به طوری که هر مرحله از سیستم باعث ارتقای سهم هیدروژن و کاهش آلاینده‌ها می‌شود. علاوه بر این، تحلیل دقیق اثر دمای گازی‌سازی بر ترکیب گاز سنتز و عملکرد غشای پالادیوم، بهینه‌سازی شرایط عملیاتی و افزایش بهره‌وری سیستم را ممکن می‌سازد. این تحقیق هم در زمینه تولید انرژی پاک و کاهش انتشار گازهای گلخانه‌ای مؤثر است و هم به توسعه فناوری‌های بومی، ارتقای توانمندی‌های صنعتی داخلی و تأمین انرژی پایدار در مناطق دور افتاده کمک می‌کند. از این نظر، مقاله حاضر

^۵ Biancini

^۶ Aspen Plus

^۷ Jadoon

^۸ Suparmin

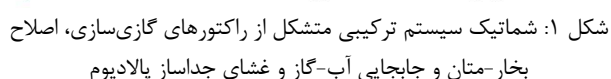
^۱ Wondra

^۲ Nanadegani

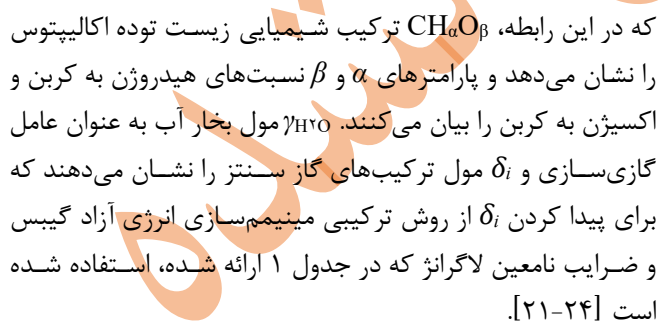
^۳ Sunden

^۴ Yin

۲- معرفی و مدل سازی سیستم



رابطه (۱) فرآیند گازی‌سازی زیست توده اکالیپتوس با عامل گازی‌سازی بخار آب را نشان می‌دهد [۲۰]:

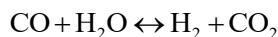
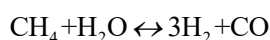


شکل ۱ آرایش کلی سیستم انرژی پیشنهادی را نمایش می‌دهد. در ابتدا، زیست توده اکالیپتوس به همراه بخار آب وارد راکتور گازی سازی می‌شود. در این مرحله، اکالیپتوس تحت دماهای بالا دچار تجزیه حرارتی شده و در نتیجه واکنش‌های گازی سازی، گاز سنتز تولید می‌گردد. گاز سنتز حاصل شامل هیدروژن، مونواکسید کربن، متان، دی اکسید کربن و بخار آب است. در ادامه، گاز سنتز تولید شده به راکتور اصلاح بخار-متان هدایت می‌شود که در آن متان موجود به هیدروژن و دی اکسید کربن تبدیل شده و در نتیجه، سهم هیدروژن در ترکیب گاز افزایش می‌یابد. سپس، گاز سنتز غنی شده از هیدروژن وارد راکتور جابجایی آب-گاز می‌شود. در این راکتور، واکنش میان مونواکسید کربن و بخار آب منجر به تولید بیشتر هیدروژن و دی اکسید کربن شده و درصد هیدروژن در گاز خروجی افزایش می‌یابد. در مرحله پایانی، گاز سنتز وارد غشای جداساز پالادیومی می‌شود که توانایی جداسازی انتخابی هیدروژن از سایر اجزای گاز را دارد. هیدروژن خالص جدا شده در یک مخزن ذخیره سازی جمع آوری می‌شود. به صورت کلی، در مرحله نخست، گازی سازی زیست توده اکالیپتوس با بخار آب منجر به تولید گاز سنتز با درصد قابل توجهی هیدروژن می‌شود. در مراحل بعدی، راکتور اصلاح بخار-متان و راکتور جابجایی آب-گاز با تبدیل متان و مونوکسید کربن به هیدروژن (در اثر واکنش با بخار آب)، بدون افزودن منبع کربنی جدید، سهم مولی هیدروژن را به طور پیوسته افزایش می‌دهند.

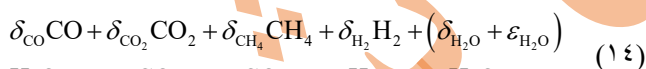
$dG + \sum_{j=1}^m \xi_j d\lambda_j = 0$	(۷)
$dG = \sum_{i=1}^k \mu_i dv_i + \sum_{j=1}^m \xi_j \sum_{i=1}^k \left(\frac{\partial \lambda_j}{\partial v_i} \right)_{v_i, j \neq i} dv_i = 0$	(۸)
$dG = \sum_{i=1}^k \left[\mu_i + \sum_{j=1}^m \xi_j \left(\frac{\partial \lambda_j}{\partial v_i} \right)_{v_i, j \neq i} \right] dv_i = 0$	(۹)
$\left(\mu_i + \sum_{j=1}^m \xi_j \left(\frac{\partial \lambda_j}{\partial v_i} \right)_{v_i, j \neq i} = 0 \right)_{i=1..k}$	(۱۰)
$\left(\mu_i + \sum_{j=1}^m \xi_j e_{i,j} = 0 \right)_{i=1..k}$	(۱۱)

زیست توده بکار رفته در این تحقیق به عنوان خوراک، اکالیپتوس به مشخصات ۵۲/۸۰ درصد کربن، ۶/۴۰ درصد هیدروژن، ۴۰/۴۰ درصد اکسیژن و ۰/۴۰ درصد نیتروژن می‌باشد [۲۵].

رابطه (۱۲) واکنش اصلاح بخار-متان و رابطه (۱۳) واکنش جابجایی آب-گاز [۲۶] را نشان می‌دهد:

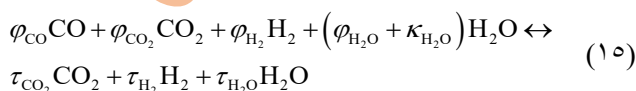


رابطه (۱۴) واکنش شکل گرفته در راکتور اصلاح بخار-متان را نشان می‌دهد:



که در این رابطه، $\varepsilon_{\text{H}_2\text{O}}$ بخار آب اضافه شده به واکنش است و φ_i به مول‌های اجزای گاز سنتز در خروجی راکتور اصلاح بخار-متان اشاره دارد.

رابطه (۱۵) واکنش شکل گرفته در راکتور جابجایی آب-گاز را نشان می‌دهد:



که در این رابطه، $\kappa_{\text{H}_2\text{O}}$ بخار آب اضافه شده به راکتور جابجایی آب-گاز را نشان می‌دهد و τ_i به مول‌های اجزای گاز سنتز در خروجی راکتور جابجایی آب-گاز اشاره دارد.

مول‌های هر عنصر مانند رابطه (۴) ثابت باشد. $E_{in,j}$ مقدار ورودی هر جزء در مخلوط خوراک را نشان می‌دهد. تابع λ_j به گونه‌ای فرموله شده است که وقتی تعادل عنصری برای عنصر j برقرار باشد، مقداری برابر با صفر داشته باشد. عدد m نشان دهنده تعداد کل عناصر مختلف موجود در همه گونه‌ها است. از آنجایی که قید تساوی باید مقداری برابر با صفر داشته باشد، مشتق کل رابطه (۴) نیز باید صفر باشد. از آنجایی که λ_j فقط به مقادیر مولی اجزا بستگی دارد، مشتق کل λ_j توسط رابطه (۵) داده می‌شود. مطابق با رابطه (۴)، باید موازنه دقیقی به دست آید به طوری که مشتق جزئی λ_j نسبت به v_i برابر با $e_{i,j}$ ، یعنی تعداد مول‌های عنصر j در ماده i مطابق رابطه (۶) باشد. در روش ضرایب نامعین لاگرانژ، مشتق کل هر معادله در ضریب ξ_j ضرب می‌شود که اغلب با مشتق کل G ترکیب می‌شود. در رابطه (۷)، عبارت dG با عبارت رابطه (۳) جایگزین می‌شود و مقدار $d\lambda_j$ در عبارت دوم با عبارت رابطه (۵) جایگزین می‌شود. در نتیجه، رابطه (۷) به رابطه (۸) تبدیل می‌شود. پس رابطه (۸) به رابطه (۹) تغییر می‌یابد. همانطور که در رابطه (۱۰) نشان داده شده است، برای اینکه مشتق کل dG در تمام موارد صفر و ثابت باشد، عبارت داخل پرانتز برای هر جمع باید برابر با صفر باشد. با جایگزینی رابطه (۶) در رابطه (۱۰)، رابطه (۱۱) بدست می‌آید.

جدول ۱: روش مینیمم‌سازی انرژی آزاد گیبس و ضرایب نامعین لاگرانژ

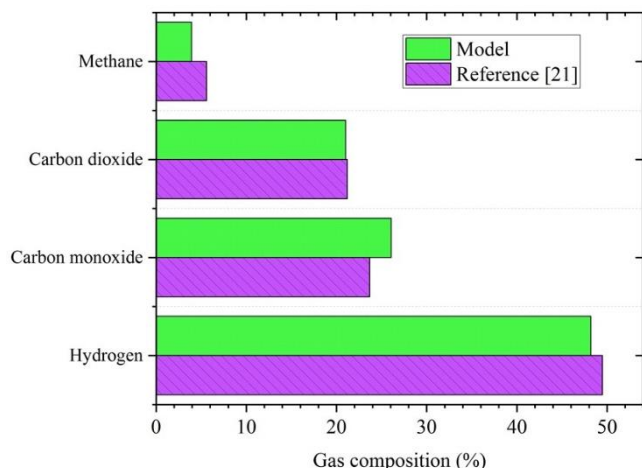
Table 1: Gibbs free energy minimization approach coupled Lagrange undetermined multipliers method

$G = \sum_{i=1}^k v_i \mu_i$	(۲)
$dG = \sum_{i=1}^k \mu_i dv_i = 0$	(۳)
$\left(\lambda_i = \sum_{j=1}^m v_i e_{i,j} - E_{in,j} = 0 \right)_{j=1..m}$	(۴)
$\left(d\lambda_i = \sum_{j=1}^m \left(\frac{\partial \lambda_j}{\partial v_i} \right)_{v_i, j \neq i} dv_i = 0 \right)_{j=1..m}$	(۵)
$\left(\frac{\partial \lambda_j}{\partial v_i} \right)_{v_i, j \neq i} = e_{i,j}$	(۶)

Hydrogen	۶,۴۰	Moisture	۰,۷۰
Oxygen	۴۰,۴۰	Ash	۱۰,۶۰
Nitrogen	۰,۴۰		
Sulfur	-		

۳ - نتایج و بحث

پیش از بررسی اثر پارامترهای عملیاتی بر خروجی‌های سیستم انرژی، صحت‌سنجی محرک اصلی سیستم انجام می‌گیرد. نتایج این صحت‌سنجی در شکل ۲ ارائه شده است. با دقت در شکل ۲ می‌توان دریافت که نتایج به‌دست‌آمده از مدل‌سازی حاضر، همخوانی مناسبی با داده‌های تجربی گزارش‌شده در مرجع [۲۱] دارد که بیانگر دقت و اعتبار مدل توسعه یافته است.



شکل ۲: صحت‌سنجی سهم مشارکت گازها در گاز سنتز تولیدی در گازی‌ساز
Figure ۲: Validation of gases contribution in syngas production in the gasifier

شکل ۳ تغییرات ترکیب گاز سنتز تولیدی از فرآیند گازی‌سازی را بر حسب نسبت بخار به زیست توده (STBR) را نشان می‌دهد. با افزایش نسبت بخار به زیست توده، مشارکت بخار در واکنش‌های گازی‌سازی افزایش یافته و در نتیجه سهم بخار در گاز خروجی بیشتر می‌شود. همزمان، کسر مولی مونوکسیدکربن به طور قابل توجهی (۳۰/۲ به ۱۲/۲ درصد) کاهش می‌یابد که عمدتاً ناشی از تقویت واکنش جابجایی آب-گاز است. در مقابل، متان کمترین سهم مولی را داشته و تغییرات کسر مولی متان با افزایش نسبت بخار به زیست

لازم به ذکر است که تعداد مول‌های مجهول در راکتور اصلاح بخار-متان و راکتور جابجایی آب-گاز با استفاده از روش ترکیبی مینیمم‌سازی انرژی آزاد گیس و ضرایب نامعین لاگرانژ با استفاده از روابط (۲) تا (۱۱) محاسبه می‌گردند.

رابطه (۱۶)، شار هیدروژن (J_H) در غشای جداساز پالادیوم را نشان می‌دهد [۲۷]:

$$J_H = \frac{Pe(\sqrt{P_f} - \sqrt{P_p})}{x} \quad (16)$$

که در این رابطه، Pe نفوذپذیری هیدروژن، P_f فشار سمت تغذیه و P_p فشار در سمت نفوذ را نشان می‌دهد.

Pe ، نفوذپذیری هیدروژن، از رابطه (۱۷) به دست می‌آید [۲۶]:

$$Pe = Pe_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (17)$$

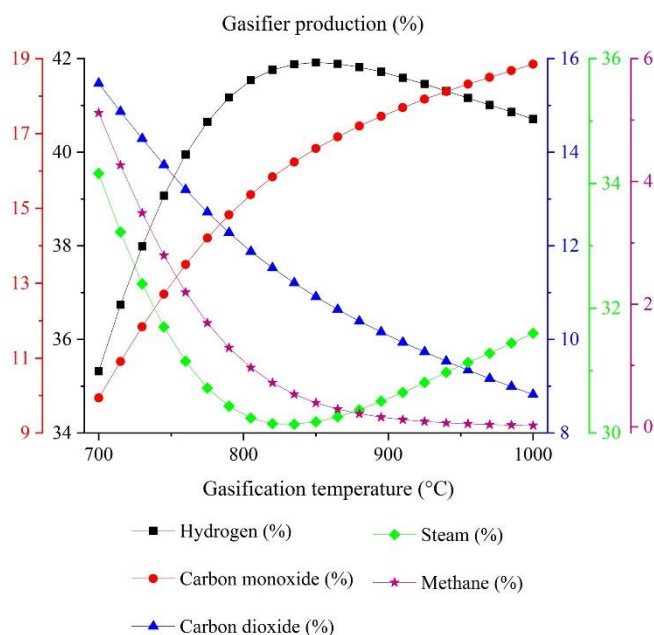
که در این رابطه، Pe_0 حداکثر نفوذپذیری، E_a انرژی فعال‌سازی، R ثابت جهانی گازها و T دما را نشان می‌دهد.

جدول ۲ پارامترهای ورودی و پایه استفاده شده در مدل‌سازی سیستم پیشنهادی را نشان می‌دهد.

جدول ۲: پارامترهای پایه و ورودی [۲۱-۲۵ و ۲۷-۲۹]

Table ۲: Baseline and input parameters [۱۸-۱۹, ۲۳-۲۵]

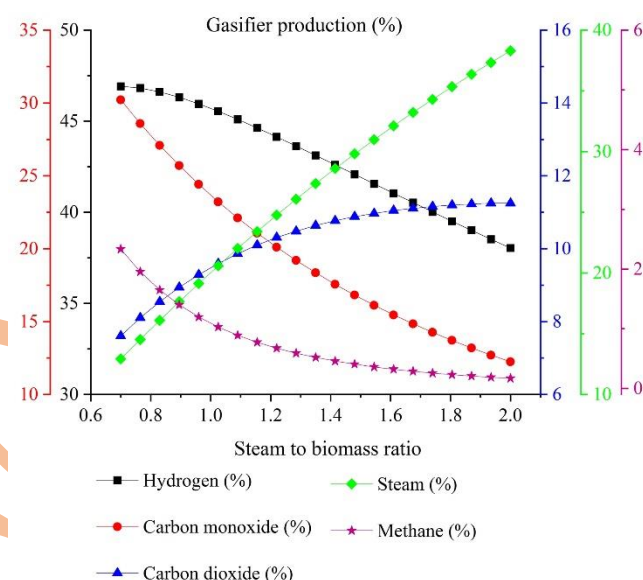
Parameter		Value	Unit
Pressure of gasifier		۵۰۰	kPa
Temperature of gasifier (Baseline)		۸۵۰	°C
Steam to Eucalyptus ratio		۱,۵	-
Pressure of SMR		۴۹۸,۱	kPa
Temperature of SMR		۸۲۳,۲	°C
Pressure of WGSR		۴۹۷,۱	kPa
Temperature of WGSR		۶۲۳,۲	°C
Pressure of palladium membrane		۴۹۶,۲	kPa
Temperature of palladium membrane		۶۲۳,۲	°C
Exponent of palladium membrane		۰,۵	-
Thickness of palladium membrane		۶	μm
Activation energy of palladium membrane		۱۶۷۰۰	J/mol
Pressure drops		۵	%
Atmospheric pressure		۱۰۱,۳	kPa
Atmospheric temperature		۲۵	°C
Eucalyptus chemical data (wt %)			
Ultimate analysis		Proximate analysis	
Carbon	۵۲,۸۰	Combustible	۸۸,۷۰



شکل ۴: تغییرات گاز سنتز فرآیند گازی‌سازی بر اثر تغییرات دما
Figure ۳: Variation of gasification process syngas versus temperature

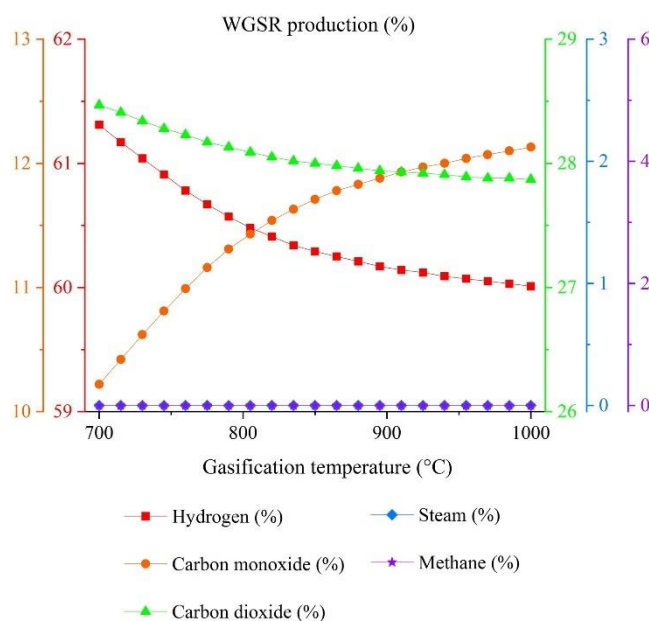
پس از خروج گازها از راکتور گازی‌سازی، جریان حاصل به راکتور اصلاح بخار-متان هدایت می‌شود. دمای عملکرد این راکتور به صورت تابعی از دمای راکتور گازساز تعریف شده است؛ به طوری که افزایش دمای گازی‌سازی مستقیماً منجر به افزایش دمای راکتور اصلاح بخار-متان می‌شود. تأثیر این تغییرات دمایی بر ترکیب گازهای حاصل از فرآیند اصلاح بخار-متان در شکل ۵ ارائه شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش دما، سهم هیدروژن در گاز تولیدی از ۴۲/۹۷ به ۵۱/۸۷ درصد افزایش می‌یابد. همزمان، میزان مشارکت منواکسیدکربن نیز رشد قابل توجهی داشته و از ۲۳/۹۷ به ۳۵/۱۸ درصد می‌رسد. این روند رفتاری را می‌توان با استفاده از رابطه (۱۲) و بر اساس اصل لوشاتلیه تحلیل کرد. از آنجا که واکنش اصلاح بخار-متان ماهیت گرماگیر دارد، افزایش دمای واکنش موجب جابه‌جایی تعادل به سمت تشکیل محصولات شده و در نتیجه تولید هیدروژن و منواکسیدکربن افزایش می‌یابد. در مقابل، افزایش دمای راکتور سبب کاهش سهم دی‌اکسیدکربن در ترکیب گاز خروجی به میزان ۴/۱۷ درصد می‌شود، در حالی که تغییرات مربوط به بخار آب در ترکیب گاز بسیار محدود و تقریباً ناچیز است.

توده چندان محسوس نیست، که نشان‌دهنده پایداری نسبی تعادل واکنش‌های مربوطه در این بازه عملیاتی است. درصد تولید هیدروژن (۴۶/۹ به ۳۸/۰ درصد) کاهش و دی‌اکسیدکربن (۷/۶ به ۱۱/۲ درصد) افزایش می‌یابد. لازم به ذکر است که تحلیل بر مبنای مول تر انجام شده است.

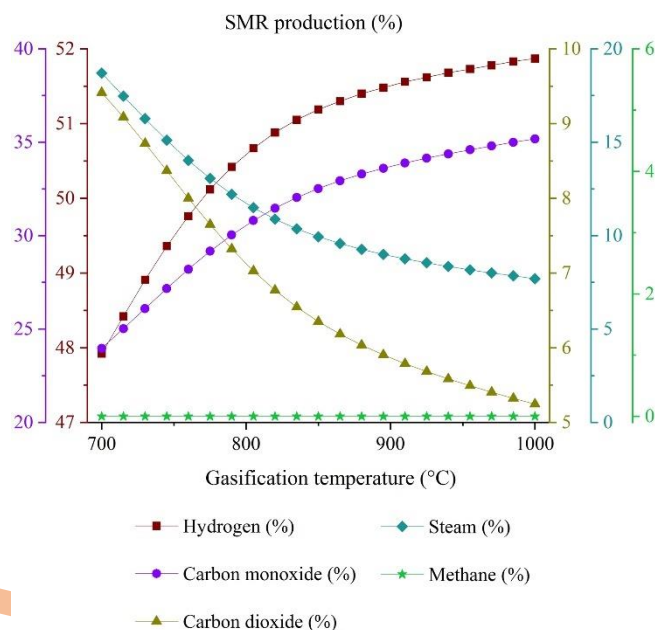


شکل ۳: تغییرات گاز سنتز فرآیند گازی‌سازی بر اثر تغییرات بخار به زیست توده
Figure ۳: Variation of gasification process syngas versus steam to biomass ratio

شکل ۴ تأثیر تغییرات دمای فرآیند گازی‌سازی را بر ترکیب گاز تولیدی شامل هیدروژن، منواکسیدکربن، دی‌اکسیدکربن، بخار آب و متان نشان می‌دهد. افزایش دمای فرآیند گازی‌سازی اثر کاهنده‌ای بر تولید بخار آب و متان دارد، به گونه‌ای که سهم متان از ۵/۱۲ به ۰/۰۲ درصد می‌یابد. در حالی که سهم هیدروژن در گاز تولیدی از ۳۵/۳۲ به ۴۰/۷۱ درصد و سهم منواکسیدکربن از ۹/۹۳ به ۱۸/۸۵ درصد افزایش می‌یابد. همچنین میزان دی‌اکسیدکربن از ۱۵/۷۴ به ۸/۸۲ درصد کاهش نشان می‌دهد. این روند را می‌توان با واکنش بودوارد توضیح داد؛ واکنشی گرماگیر که در دماهای بالاتر به سمت مصرف دی‌اکسیدکربن و تولید منواکسیدکربن پیش می‌رود. روند تغییرات مشاهده شده با نتایج گزارش شده در مطالعات پیشین تطابق مناسبی دارد [۲۸-۳۱].



شکل ۶: تغییرات گاز سنتز فرآیند جابجایی آب-گاز بر اثر تغییرات دما
Figure ۶: Variation of water-gas shift process syngas versus temperature



شکل ۵: تغییرات گاز سنتز فرآیند اصلاح بخار-متان بر اثر تغییرات دما
Figure ۵: Variation of steam methane reforming process syngas versus temperature

تأثیر افزایش دمای راکتور گازی‌سازی بر شار عبوری هیدروژن از غشای جداساز پالادیومی در شکل ۷ نشان داده شده است. دمای غشای پالادیوم نیز مشابه سایر اجزای سیستم، تابعی از دمای راکتور گازی‌سازی در نظر گرفته شده و با افزایش آن، دمای غشا نیز افزایش می‌یابد. نتایج بیانگر آن است که با افزایش دما، شار هیدروژن از ۰/۲۹ به ۱/۵۲ افزایش پیدا می‌کند. این موضوع نشان می‌دهد که عملکرد جداسازی هیدروژن در دماهای بالاتر به‌طور قابل ملاحظه‌ای بهبود می‌یابد. این افزایش شار را می‌توان با در نظر گرفتن رابطه مستقیم بین شار هیدروژن و نفوذپذیری آن توضیح داد. بر اساس معادله (۱۶)، شار هیدروژن تابعی از نفوذپذیری است و مطابق معادله (۱۷)، نفوذپذیری هیدروژن با افزایش دما افزایش می‌یابد. بنابراین، افزایش دمای سیستم منجر به بهبود نفوذپذیری و در نتیجه افزایش شار هیدروژن عبوری از غشا می‌شود.

لازم به ذکر است که بر اساس نتایج مدل‌سازی ترمودینامیکی، حدود ۸۵ درصد از زیست توده اکالیپتوس ورودی به گاز سنتز قابل استفاده تبدیل شده است. بازده گاز سرد در این پژوهش برابر با ۷۹/۷ درصد محاسبه شده است. این پارامتر بر اساس نسبت ارزش حرارتی گاز سنتز خروجی به ارزش حرارتی زیست توده ورودی و با در نظر گرفتن

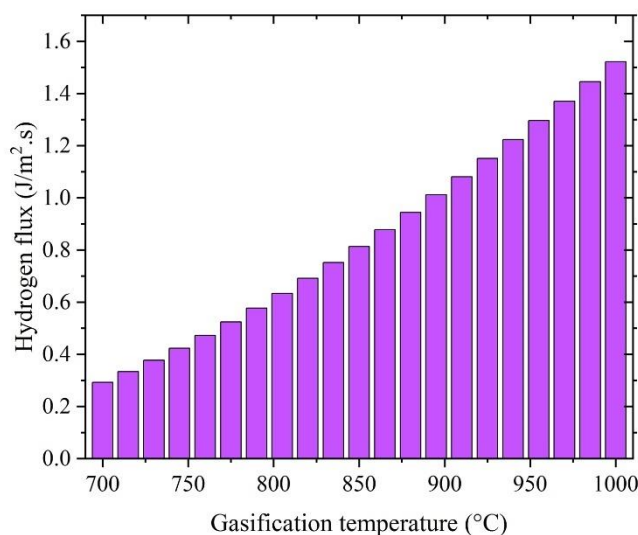
تغییرات ترکیب گاز در فرآیند جابجایی آب-گاز تحت تأثیر افزایش دمای راکتور در شکل ۶ بررسی شده است. همان‌طور که پیش‌تر اشاره شد، دمای راکتور جابجایی آب-گاز نیز مشابه راکتور اصلاح بخار-متان، وابسته به دمای راکتور گازی‌سازی است؛ از این رو افزایش دمای گازی‌سازی موجب افزایش دمای این بخش از سیستم نیز می‌شود. بررسی نتایج نشان می‌دهد که با بالا رفتن دما، میزان تبدیل به هیدروژن در گاز خروجی از ۶۱/۳۱ به ۶۰/۰۱ درصد کاهش می‌یابد، در حالی که سهم دی‌اکسیدکربن از ۱۰/۲۲ به ۱۲/۱۳ درصد افزایش پیدا می‌کند. تغییرات درصد بخار آب در این مرحله بسیار محدود بوده و حدود ۰/۶۰ درصد گزارش شده است. علت این رفتار به ماهیت گرماده واکنش جابجایی آب-گاز بازمی‌گردد؛ به‌طوری که افزایش دمای واکنش باعث جابه‌جایی تعادل به سمت کاهش تولید هیدروژن و افزایش محصولات جانبی می‌شود.

- افزایش دمای راکتور گازی سازی موجب بهبود سهم هیدروژن در گاز خروجی از ۳۵/۳۲ به ۴۰/۷۱ درصد و افزایش منواکسیدکربن از ۹/۹۳ به ۱۸/۸۵ درصد می شود.

گازهای خروجی از گازی ساز محاسبه گردیده است، زیرا بازده گاز سرد یکی از شاخص های ذاتی عملکرد گازی ساز بوده و به مراحل پایین دستی سیستم وابسته نیست.

منابع

1. Yu Z. Kamran H.W. Amin A. Ahmed B. and Peng S. ۲۰۲۳. Sustainable synergy via clean energy technologies and efficiency dynamics. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 187, pp. ۱۱۳۷۴۴. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2023.113744>
2. Hamidieh A. Akhgari B. (۲۰۲۴). Biogas Reverse Supply Chain Network Design based on Biomass Quality Levels using Robust Programming and Benders decomposition approach, *Scientia Iranica*. <https://doi.org/10.24260/sci.2024.61889.7041>
3. Gharibi A. Doniavi E. and Hasanzadeh R. ۲۰۲۴. A metaheuristic particle swarm optimization for enhancing energetic and exergetic performances of hydrogen energy production from plastic waste gasification. *Energy Conversion and Management*, 308, pp. ۱۱۸۳۹۲. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2024.118392>
4. Rubinsin N.J. Karim N.A. Timmiati S.N. Lim K.L. Isahak W.N.R.W. and Pudukudy M. ۲۰۲۴. An overview of the enhanced biomass gasification for hydrogen production. *International Journal of Hydrogen Energy*, 49, pp. ۱۱۳۹-۱۱۶۴. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.09.043>
5. Adeniyi A. G. Onifade D. V. Ighalo J. O. (۲۰۲۲). Evaluating the nature of captured exhaust soot from a retort heating carbonization system, *Scientia Iranica*, ۲۹(۳), pp. ۱۴۲۷-۱۴۳۵. <https://doi.org/10.24260/sci.2021.070.08.017>
6. Yan B. Jia X. Li J. Li Z. Che Y. Zhou Z. Zhao J. Zhou S. and Chen G. ۲۰۲۴. In-situ elimination of biomass gasification tar based on the understanding of tar formation process: A review. *Journal of the Energy Institute*, 112, pp. ۱۰۱۴۷۷. <https://doi.org/10.1016/j.joei.2023.101477>
7. Ajourloo M. Ghodrat M. Scott J. and Strezov V. ۲۰۲۵. Evaluating the role of feedstock composition and component interactions on biomass gasification. *Fuel*, 381, pp. ۱۳۳۵۲۸. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.133528>
8. Jokar S.M. Farokhnia, A. Tavakolian M. Pejman M. Parvasi P. Javanmardi J. Zare F. Goncalves M.C. and Basile, A. ۲۰۲۳. The recent areas of applicability of palladium based membrane technologies for hydrogen production from methane and natural gas: A review. *International Journal of*



شکل ۷: تغییرات شار هیدروژن بر اثر تغییرات دما

Figure ۷: Variation of hydrogen flux versus temperature

نتیجه گیری و جمع بندی

این پژوهش به مطالعه امکان تولید انرژی و خالص سازی هیدروژن از اکالیپتوس از طریق فرآیند گازی سازی می پردازد. استفاده از منابع تجدیدپذیر در کنار فناوری های پیشرفته، علاوه بر افزایش بازده و بهره وری سیستم، نقش مؤثری در کاهش انتشار گازهای گلخانه ای ایفا می کند و زمینه تولید هیدروژن پاک و سبز را فراهم می سازد. نتایج کلی حاصل از مطالعه حاضر به صورت زیر قابل جمع بندی است:

- افزایش دما در راکتور جابجایی آب-گاز سبب کاهش سهم هیدروژن از ۶۱/۳۱ به ۶۰/۰۱ درصد و افزایش سهم دی اکسیدکربن از ۱۰/۲۲ به ۱۲/۱۳ درصد می شود.
- با بالا رفتن دمای راکتور اصلاح بخار-متان، سهم دی اکسیدکربن در گاز خروجی این بخش حدود ۴/۱۷ درصد کاهش می یابد.
- افزایش دمای راکتور گازی سازی موجب بهبود شار هیدروژن عبوری از غشای پالادیومی از ۰/۲۹ به ۱/۵۲ می گردد.

۱۷. Faraji M. and Saidi M. ۲۰۲۲. Process simulation and optimization of groundnut shell biomass air gasification for hydrogen-enriched syngas production. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47(۲۸), pp.۱۳۵۷۹-۱۳۵۹۱. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.۲۰۲۲.۰۲.۱۰۵>
۱۸. Suparmin, P. Purwanti N. Nelwan L.O. and Tambunan A.H. ۲۰۲۴. Syngas production by biomass gasification: A meta-analysis. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 206, ۱۱۴۸۲۴. <https://doi.org/10.1016/j.rser.۲۰۲۴.۱۱۴۸۲۴>
۱۹. Safary Sabet S. Mostafa Namar M. Sheikholeslami M. Shafee A. (۲۰۲۰). Thermodynamic analysis of a high-temperature hydrogen production system, *Scientia Iranica*, 27(۴), pp. ۱۹۶۲-۱۹۷۱. <https://doi.org/10.242۰۰/sci.۲۰۱۹.۵۲۰۲۲.۲۴۸۷>
۲۰. Xiao Z. and Wu W. ۲۰۲۴. Environmental sustainability by an integrated system based on municipal solid waste fluidized bed gasification using energy, exergy, and environmental analyses. *Applied Thermal Engineering*, 239, pp.۱۲۲۱۷۱. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.۲۰۲۳.۱۲۲۱۷۱>
۲۱. Loha C. Chattopadhyay H. and Chatterjee P.K. ۲۰۱۱. Thermodynamic analysis of hydrogen rich synthetic gas generation from fluidized bed gasification of rice husk. *Energy*, 36(۷), pp.۴۰۶۳-۴۰۷۱. <https://doi.org/10.1016/j.energy.۲۰۱۱.۰۴.۰۴۲>
۲۲. Shabbar S. and Janajreh I. ۲۰۱۳. Thermodynamic equilibrium analysis of coal gasification using Gibbs energy minimization method. *Energy conversion and management*, 65, pp.۷۵۵-۷۶۳. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.۲۰۱۲.۰۲.۰۳۲>
۲۳. Gambarotta A. Morini M. and Zubani A. ۲۰۱۸. A non-stoichiometric equilibrium model for the simulation of the biomass gasification process. *Applied Energy*, 227, pp.۱۱۹-۱۲۷. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.۲۰۱۷.۰۷.۱۳۵>
۲۴. Kangas P. Hannula I. Koukkari P. and Hupa M. ۲۰۱۴. Modelling super-equilibrium in biomass gasification with the constrained Gibbs energy method. *Fuel*, 129, pp.۸۶-۹۴. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.۲۰۱۴.۰۳.۰۳۴>
۲۵. Mojaver P. Jafarmadar S. Khalilarya S. and Chitsaz A. ۲۰۱۹. Study of synthesis gas composition, exergy assessment, and multi-criteria decision-making analysis of fluidized bed gasifier. *International Journal of Hydrogen Energy*, 48(۱۶), pp.۶۴۵۱-۶۴۷۶. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.۲۰۲۲.۰۵.۲۹۶>
۲۶. Ghasemzadeh K. Torabi T. Amiri T.Y. Fortunelli A. and Iulianelli A. ۲۰۲۴. Parametric and sensitive analysis of Pd-Ag membrane reactor performance in biogas reforming to generate decarbonized hydrogen by Computational Fluid Dynamic-Response Surface Methodology. *Fuel*, 365, pp.۱۳۱۲۰۵. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.۲۰۲۴.۱۳۱۲۰۵>
۲۷. Nemitallah, M.A. ۲۰۲۳. Characteristics of hydrogen separation and methane steam reforming in a Pd-based membrane reactor of shell and tube design. *Case Studies in Thermal Engineering*, 45, pp.۱۰۲۹۳۹. <https://doi.org/10.1016/j.csite.۲۰۲۳.۱۰۲۹۳۹>
۲۸. Wondra, C. Hafner M. Treiber P. and Karl J. ۲۰۲۵. Conditioning of synthesis gases from gasification for direct use in conventional burner systems. *Thermal Science and Engineering Progress*, 60, pp.۱۰۳۴۸۹. <https://doi.org/10.1016/j.tsep.۲۰۲۵.۱۰۳۴۸۹>
۲۹. Nanadegani, F.S. and Sunden, B. ۲۰۲۳. Review of exergy and energy analysis of fuel cells. *International Journal of Hydrogen Energy*, 48(۸۴), pp.۳۲۸۷۵-۳۲۹۴۲. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.۲۰۲۳.۰۵.۰۵۲>
۳۰. Yin, Z. Yang J. Feng Y. Ma Z. Wang J. and Liu Q. ۲۰۲۵. Thermodynamics analysis of a biomass co-gasification based combined cooling, heating and power system. *Renewable Energy*, 248, pp.۱۲۳۱۹۵. <https://doi.org/10.1016/j.renene.۲۰۲۵.۱۲۳۱۹۵>
۳۱. Biancini G. Moradi R. Cioccolanti L. Marchetti B. Moglie M. and Del Zotto L. ۲۰۲۳. A general model for air gasification of heterogenous municipal solid waste. *Energy Conversion and Management*, 278, pp.۱۱۶۷۴۹. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.۲۰۲۳.۱۱۶۷۴۹>
۳۲. Jadoon U.K. Diaz I. and Rodriguez M. ۲۰۲۵. Comparative analysis of aspen plus simulation strategies for woody biomass air gasification processes. *Biomass and Bioenergy*, 194, pp.۱۰۷۶۲۶. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.۲۰۲۵.۱۰۷۶۲۶>
۳۳. Fakhim-Ghanbarzadeh B. Fani M. Farhanieh B. (۲۰۱۱). Exergoeconomic optimization of combined heat and power system incorporating fluidized bed gasifier, *Sharif Journal of Mechanical Engineering (SJME)*, 27.3(۲), pp. ۳-۱۳ [In Persian].

- Energy, 44(۵۱), pp.۲۷۷۲۶-۲۷۷۴۰.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.۲۰۱۹.۰۸.۲۴۰>
۲۶. Chen J. Wang X. Gai D. and Wang J. ۲۰۲۰. B-site semi-doped LaFeO_۳ perovskite oxygen carrier for biomass chemical looping steam gasification to produce hydrogen-rich syngas. *International Journal of Hydrogen Energy*, 103, pp.۴۴۶-۴۵۰.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.۲۰۲۰.۰۱.۱۹۰>
۲۷. Al-Mufachi N.A. Rees N.V. and Steinberger-Wilkens, R., ۲۰۱۵. Hydrogen selective membranes: A review of palladium-based dense metal membranes. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 47, pp. ۵۴۰-۵۵۱.
<https://doi.org/10.1016/j.rser.۲۰۱۵.۰۳.۰۲۶>
۲۸. Khattak O.A. and Zhang Q. ۲۰۲۰. Catalytic Gasification of Petroleum Coke with K₂CO₃: Impact of Catalyst-Carbon Contact and the Role of the Boudouard Reaction at ۹۵۰° C. *European Journal of Applied Science, Engineering and Technology*, 3(۳), pp.۴۴-۵۰.
[https://doi.org/10.۵۹۳۲۴/ejaset.۲۰۲۰.۳\(۳\).۰۵](https://doi.org/10.۵۹۳۲۴/ejaset.۲۰۲۰.۳(۳).۰۵)
۲۹. Wu C.H. Chang C.Y. Cheng C.M. and Huang H.C. ۲۰۰۳. Glycolysis of waste flexible polyurethane foam. *Polymer Degradation and Stability*, 80(۱), pp.۱۰۳-۱۱۱.
[https://doi.org/10.1016/S۰۱۴۱-۳۹۱۰\(۰۲\)۰۰۳۹۰-۷](https://doi.org/10.1016/S۰۱۴۱-۳۹۱۰(۰۲)۰۰۳۹۰-۷)
۳۰. Chang S. Zhang Z. Cao L. Ma L. You S. and Li W. ۲۰۲۰. Co-gasification of digestate and lignite in a downdraft fixed bed gasifier: Effect of temperature. *Energy Conversion and Management*, 213, pp. ۱۱۲۷۹۸.
<https://doi.org/10.1016/j.enconman.۲۰۲۰.۱۱۲۷۹۸>
۳۱. Han S.W. Lee J.J. Tokmurzin D. Lee S.H. Nam J.Y. Park S.J. Ra H.W. Mun T.Y. Yoon S.J. Yoon S.M. and Moon J.H. ۲۰۲۲. Gasification characteristics of waste plastics (SRF) in a bubbling fluidized bed: Effects of temperature and equivalence ratio. *Energy*, 238, pp.۱۲۱۹۴۴.
<https://doi.org/10.1016/j.energy.۲۰۲۱.۱۲۱۹۴۴>