

مدلسازی زمان سوزش نانو ذرات آلومینیوم بر مبنای دمای اشتعال

سیدنوراله حسینی^۱، جلیل فریدونی^{۲*}، مهدی بیدآبادی^۳، سعید محمدی^۴

دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی مکانیک، آزمایشگاه تحقیقاتی سوخت و احتراق

(* نویسنده مخاطب: fereidooni@iust.ac.ir)

چکیده

در این مقاله یک مدل تحلیلی برای محاسبه زمان سوزش تک ذره آلومینیوم بر مبنای دمای اشتعال ارائه شده است. برای این منظور، فرایند انتقال حرارت بین تک ذره و گاز اطراف در رژیم‌های مختلف انتقال حرارت بررسی شده است. انتقال حرارت بین ذره و گاز اطراف می‌تواند در یکی از رژیم‌های پیوسته، گذرا و یا رژیم آزاد مولکولی رخ دهد. دمای ذرات بواسطه حرارت دریافتی از ناحیه واکنش بالا رفته تا اینکه سرانجام به دمای اشتعال می‌رسد. در این مقاله با استفاده از شرایط لازم برای رسیدن دمای ذرات به دمای شروع احتراق، زمان سوزش تک ذره آلومینیوم محاسبه شده است. تفاوت عمده مدل ارائه شده در این مقاله با مدل قبلی که برای نانو ذرات آلومینیوم استفاده می‌شد، در این است که مدل قبلی در دماهای بالا در حدود ۱۵۰۰ کلوین کاربرد دارد، ولی مدل حاضر در شرایط مختلف دما جواب‌های مناسبی می‌دهد و زمان سوزش را به صورت تابعی از قطر ذره و دمای گاز اطراف محاسبه می‌کند. زمان سوزش بدست آمده از این مدل با نتایج تجربی مقایسه شده است. با در نظر گرفتن فرآیند انتقال حرارت در رژیم آزاد مولکولی تطابق خوبی بین نتایج تجربی و مدل تحلیلی ارائه شده در این مقاله برقرار است.

واژه‌های کلیدی: زمان سوزش - نانو ذرات - دمای اشتعال - عدد نادسن - رژیم آزاد مولکولی

۱- مقدمه

ذرات آلومینیوم بدلیل چگالی انرژی بالا، کاربرد فراوانی در صنایع مختلف از جمله پیشران‌های موشک و سیستم‌های زیرآبی دارند [۱]. اکثر کارهای قبلی در زمینه احتراق ذرات آلومینیوم، بر روی میکرو ذرات و ذرات بزرگتر متمرکز شده‌اند و هنوز تلاش‌ها برای ارائه مدل مناسب در زمینه احتراق نانو ذرات آلومینیوم به نتیجه مطلوبی نرسیده است [۲]. ذرات نانو به دلیل نسبت سطح به حجم بالایی که دارند زمان سوزش کوتاهتری نسبت به ذرات میکرونی دارند. محققین بسیاری زمان سوزش ذرات آلومینیوم را مورد بررسی قرار داده‌اند. هوانگ و همکارانش [۲] یک مدل برای زمان سوزش نانو ذرات آلومینیوم مبتنی بر نتایج تجربی ارائه کردند که در دماهای بالا استفاده می‌شود. در این مقاله زمان سوزش نانو ذره آلومینیوم به صورت تحلیلی و به کمک محاسبه دمای شروع احتراق بدست آمده است. هدف ما در کار حاضر ارائه مدلی است که زمان سوزش را بر حسب پارامترهای هندسی (قطر ذره) و محیطی (دمای گاز اطراف) محاسبه کند.

زمان سوزش یکی از پارامترهای دینامیکی احتراق و بیانگر مدت زمان حضور ذره در ناحیه واکنش است. در مسائل مرتبط با احتراق ذرات، ساختار شعله به صورت سه ناحیه ای فرض می‌شود. این سه ناحیه عبارتند از: ناحیه پیش گرم، ناحیه واکنش و ناحیه پس از واکنش. دمای ذرات در ناحیه پیش گرم بعلاوه حرارت دریافتی از ناحیه واکنش، مرتباً افزایش می‌یابد. اگر انتقال حرارت از ناحیه واکنش به ذرات ادامه یابد دمای ذرات به دمای شروع احتراق می‌رسد. در این مقاله با استفاده از همین

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران

۲- دانشجوی دکترا، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران

۳- دانشیار، دانشکده مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران

۴- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران

موضوع، زمان سوزش ذره آلومینیوم محاسبه شده است. یکی از پارامترهای مهم در تعیین رژیم انتقال حرارت بین ذره و گاز اطراف، عدد بدون بعد نادسن است. بر حسب مقدار عدد نادسن ممکن است فرایند انتقال حرارت بین ذره و گاز اطراف در یکی از رژیم های پیوسته، گذرا و یا رژیم آزاد مولکولی رخ دهد. در این مقاله فرض شده که ذرات بصورت کروی بوده و قطر ذره در انتهای واکنش به صفر برسد. همچنین از انتقال حرارت تشعشی صرفنظر شده است.

۲- تئوری

برای تک ذره آلومینیوم، دمای شروع احتراق را می توان به کمک رابطه زیر [۳] محاسبه کرد

$$m_s c_s \frac{dT}{dt} = Q_{gen} - Q_{los} \quad (1)$$

که m_s جرم ذره و c_s گرمای ویژه ذره می باشد. همچنین Q_{gen} و Q_{los} به ترتیب حرارت تولید شده توسط واکنش (حرارتی که ذره جذب می کند) و تلفات حرارتی از سطح ذره به محیط اطراف است. با مشتق گرفتن از معادله (۱) به معادله زیر می رسیم

$$m_s c_s \frac{d^2T}{dt^2} = \left(\frac{dQ_{gen}}{dT} - \frac{dQ_{los}}{dT} \right) \left(\frac{Q_{gen} - Q_{los}}{m_s c_s} \right) \quad (2)$$

یکی از شرایطی که برای رسیدن دمای ذره به دمای شروع احتراق عنوان می شود عبارت است از [۳]

$$\frac{d^2T}{dt^2} = 0 \quad (3)$$

با استفاده از شرط بیان شده و با مساوی صفر قرار دادن طرف راست معادله (۲) در نهایت به شرایط زیر خواهیم رسید

$$Q_{gen} = Q_{los} \text{ and } \frac{dQ_{gen}}{dT} = \frac{dQ_{los}}{dT} \quad (4)$$

شرایط بیان شده در (۴) برای محاسبه دمای شروع احتراق استفاده می شود.

برای تعیین اتلاف حرارت از سطح ذره باید رژیم انتقال حرارت را تعیین کرد. بدین منظور عدد بدون بعد نادسن به صورت

زیر تعریف می شود

$$k_n = \frac{l_{fm}}{r_p} \quad (5)$$

که l_{fm} متوسط مسیر آزاد مولکولی و r_p شعاع ذره است. برای نانو ذرات عمدتاً $k_n > 10$ و این بدین معنی است که متوسط مسیر آزاد مولکولی بزرگتر از شعاع نانو ذرات است، در نتیجه احتمال برخورد ذره و گاز در این شرایط کم است. اصطلاحاً بر هم کنش حرارتی بین ذره و گاز در چنین حالتی در رژیم آزاد مولکولی اتفاق می افتد و رابطه آن بصورت زیر است [۴]

$$Q_{los} = \alpha \pi r_p^2 \frac{P_g}{2} \left(\frac{8k_B T_g}{\pi m_g} \right)^{1/2} \left(\frac{\bar{\gamma} + 1}{\bar{\gamma} - 1} \right) \frac{T_p - T_g}{T_g} \quad (6)$$

که α ضریب انباشتگی، P_g فشار گاز، T_g دمای گاز، T_p دمای ذره، $\bar{\gamma}$ متوسط نسبت گرمای ویژه، k_B ثابت بولتزمن و m_g جرم مولکولی گاز است. برای ذرات با اندازه بزرگتر رژیم انتقال حرارت بین ذره و گاز اطراف بصورت پیوسته است و رابطه حاکم بر آن مطابق معادله زیر است [۴]

$$Q_{los} = 4\pi r_p^2 h_c (T_p - T_g) \quad (7)$$

برای ذرات کروی می توان از این تقریب استفاده کرد که $h_c = \frac{k_g}{r_p}$ ، در نتیجه رابطه (۷) به شکل زیر در خواهد آمد

$$Q_{los} = 4\pi r_p k_g (T_p - T_g) \quad (8)$$

که k_g ضریب انتقال حرارت هدایتی گاز است. در بسیاری از شرایط عدد نادسن به گونه ایست که رژیم انتقال حرارت بین ذره و گاز در رژیم گذرا (transition regime) می باشد. روابط مختلفی برای بیان انتقال حرارت در رژیم گذرا پیشنهاد شده که ما در این مقاله از رابطه زیر استفاده می کنیم [۴]

$$Q_{los} = \frac{4\pi r_p k_g (T_p - T_g)}{1 + \beta} \quad (9)$$

که

$$\beta = \frac{4\pi r_p k_g}{\alpha \pi r_p^2 \frac{P_g}{2} \left(\frac{8k_B T_g}{\pi m_g} \right)^{1/2} \left(\frac{\bar{\gamma} + 1}{\bar{\gamma} - 1} \right) \frac{T_p - T_g}{T_g}} \quad (10)$$

نرخ مصرف جرم ذرات را می توان از رابطه زیر حساب کرد

$$m_s = \rho_s v \xrightarrow{v = \frac{\pi}{6} d_p^3} \frac{dm_s}{dt} = -\frac{\pi}{6} \rho_s \left(\frac{d(d_p^3)}{dt} \right) \quad (11)$$

رابطه (۱۱) با این فرض بدست آمده که چگالی ذره (ρ_s) در طول واکنش ثابت باشد. اگر فرض کنیم نرخ واکنش از رابطه آرنیوس بدست می آید می توان رابطه (۱۱) را به شکل زیر نوشت [۳]

$$\dot{m}_s = \dot{m}_o \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (12)$$

که در رابطه بالا E_a انرژی فعالسازی و \bar{R} ثابت جهانی گازها است. گرمای تولید شده توسط واکنش مطابق معادله زیر بدست خواهد آمد

$$Q_{gen} = \dot{m}_s \Delta h_{com} \quad (13)$$

که در این معادله Δh_{com} آنتالپی واکنش شیمیایی است. در ادامه به کمک شرایط عنوان شده در (۴) زمان سوزش برای رژیم های مختلف انتقال حرارت بدست خواهد آمد. برای انتقال حرارت در رژیم آزاد مولکولی که توسط رابطه (۶) بیان می شود می توان زمان سوزش را بصورت زیر محاسبه کرد. با مشتق گیری از Q_{gen} و Q_{los} داریم

$$\frac{dQ_{los}}{dT} = \alpha \pi \frac{d_p^2}{8} p_g \left(\frac{8k_B T_g}{\pi m_g} \right)^{1/2} \frac{\bar{\gamma} + 1}{\bar{\gamma} - 1} \left(\frac{1}{T_g} \right) \quad (14)$$

$$\frac{dQ_{gen}}{dT} = -\frac{\pi}{6} \rho_s \frac{d}{dt} (d_p^3) \frac{E_a}{RT^2} \Delta h_{com} \quad (15)$$

و با مساوی قرار دادن معادلات (۱۴) و (۱۵) برطبق شرایط (۴) به معادله زیر می رسیم.

$$\alpha \pi \frac{d_p^2}{8} p_g \left(\frac{8k_B T_g}{\pi m_g} \right)^{1/2} \frac{\bar{\gamma} + 1}{\bar{\gamma} - 1} \left(\frac{1}{T_g} \right) = -\frac{\pi}{6} \rho_s \frac{d}{dt} (d_p^3) \frac{E_a}{RT^2} \Delta h_{com} \quad (16)$$

با انتگرال گیری از دو طرف معادله (۱۶) و استفاده از شرایط اولیه و نهایی زیر می توان زمان سوزش ذره آلومینیوم را در رژیم انتقال حرارت مولکولی آزاد بدست آورد

$$\begin{aligned} t = 0 \rightarrow d = d_p \\ t = \tau_b \rightarrow d = 0 \end{aligned} \Rightarrow \tau_{b,fmr} = \frac{4\rho_s E_a \Delta h_{com} T_g (\bar{\gamma} - 1) d_p}{3\bar{R} \alpha p_g \left(\frac{8k_B T_g}{\pi m_g} \right)^{1/2} T_{ign}^2 (\bar{\gamma} + 1)} \quad (17)$$

اگر گاز اطراف ذره را ایده آل فرض کنیم و از معادله حالت ($p = \rho RT$) استفاده کنیم معادله بالا به شکل زیر ساده می شود

$$\tau_{b,fmr} = \frac{4\rho_s E_a \Delta h_{com} T_g (\bar{\gamma} - 1) d_p}{3\bar{R} \alpha \rho R \left(\frac{8k_B T_g}{\pi m_g} \right)^{1/2} T_{ign}^2 (\bar{\gamma} + 1)} \quad (18)$$

معادله (۱۸) زمان سوزش تک ذره آلومینیوم را در رژیم آزاد مولکولی محاسبه می کند. زمان سوزش تک ذره در رژیم مولکولی پیوسته از رابطه زیر بدست می آید

$$\tau_{b,cr} = \frac{\rho_s \Delta h_{com} E_a d_p^2}{2.564037 T_{ign}^2} \quad (19)$$

و برای انتقال حرارت در رژیم گذرا و در هوا عبارت زمان سوزش به شکل زیر خواهد بود

$$\tau_{b,tr} = \frac{\rho_s \Delta h_{com} E_a d_p^2}{2.564037 T_{ign}^2} \left(1 + \frac{7.55721 \times 10^{-6}}{\alpha d_p \sqrt{T_g}} \right) \quad (20)$$

۳- نتایج

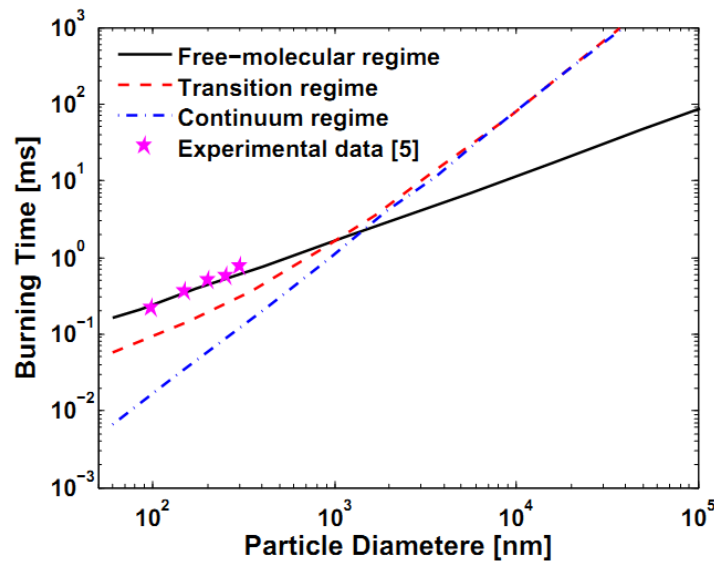
ویژگی‌های ذره آلومینیوم در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱: ویژگی‌های ذره آلومینیوم

ویژگی	مقدار
چگالی آلومینیوم (ρ_a)	$2707 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
ثابت گازها	$8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$
ضریب انبساطی آلومینیوم (α)	0.87
نسبت گرماهای ویژه هوا (γ)	1.4
ضریب بولتزمن (k_B)	$1.38 \times 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$
انرژی فعالساز آلومینیوم (E_a)	$73600 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$
گرمای واکنش ذرات آلومینیوم- هوا (Δh_{com})	$30945000 \frac{\text{J}}{\text{kg}}$

در این مدل دمای اشتعال (ignition temperature) بصورت تابعی بر حسب قطر ذره بیان شده است. برای نیل به این هدف داده‌های مختلف دمای اشتعال بر حسب قطر ذره را که توسط محققین مختلف ثبت شده [۳]، با یک منحنی برازش کردیم. رابطه ای که از برازش منحنی بدست آمده اختلاف کمی با داده های تجربی دارد و مبنای محاسبه ما برای دمای اشتعال است.

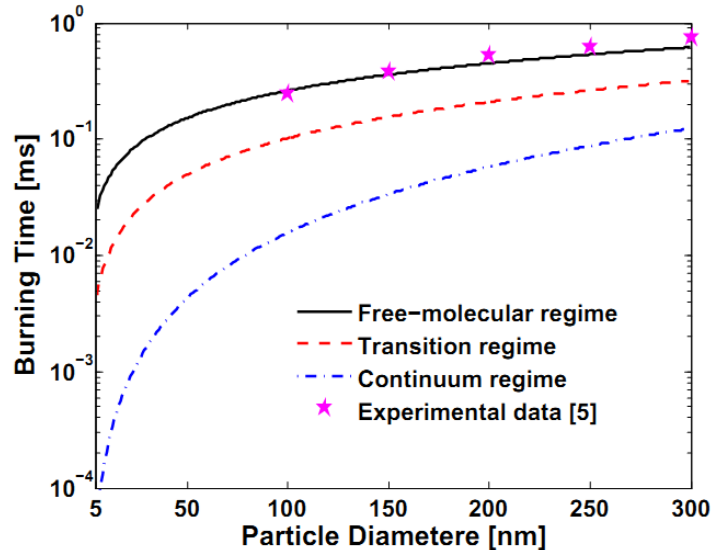
اکنون می‌توان نمودارهای زمان سوزش تک ذره آلومینیوم را بر حسب قطر ذره و در دماهای مختلف هوای اطراف رسم کرد. در شکل (۱) زمان سوزش تک ذره آلومینیوم بر حسب قطر ذره در رژیم‌های مختلف انتقال حرارت وقتی دمای هوای اطراف در ۲۹۸ کلوین است، رسم شده است.



شکل ۱- زمان سوزش ذره آلومینیوم بر حسب قطر ذره وقتی دمای هوای اطراف در ۲۹۸ کلوین است.

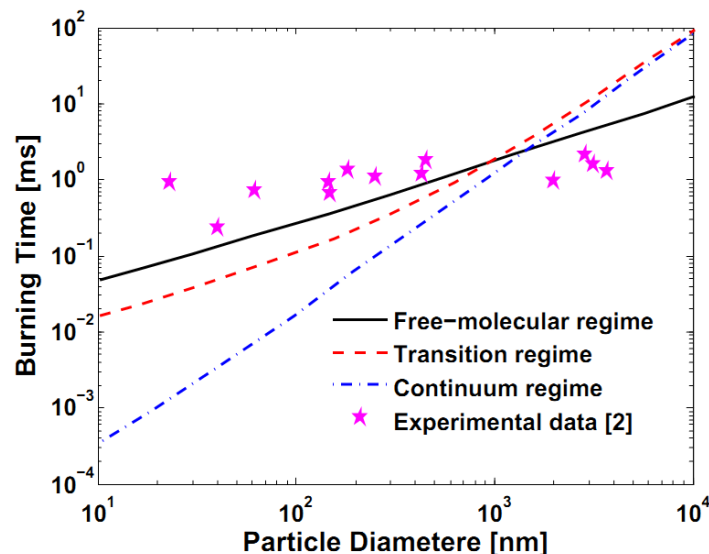
همانگونه مشاهده می‌شود مطابقت خوبی بین نتایج تجربی و مدل تئوری ارائه شده در این مقاله برای رژیم آزاد مولکولی وجود دارد. رژیم های پیوسته و گذرا برای ذرات بزرگتر از ۱۰۰ میکرون بر هم منطبق می‌شوند. نتایج نشان می‌دهند که برای

نانو ذرات می‌توان انتقال حرارت بین ذره و گاز اطراف را در رژیم آزاد مولکولی تصور کرد. شکل (۲) انطباق نتایج تجربی و مدل ارائه شده برای رژیم آزاد مولکولی را بخوبی نشان می‌دهد.



شکل ۲- زمان سوزش نانو ذره آلومینیوم بر حسب قطر ذره وقتی دمای هوای اطراف در ۲۹۸ کلوین است.

در شکل (۳) زمان سوزش تک ذره آلومینیوم وقتی دمای هوای اطراف در ۱۵۰۰ کلوین است، محاسبه شده و با نتایج تجربی مقایسه گردیده است. بین نتایج تجربی و مدل تئوری مطابقت خوبی وجود دارد. در واقع با افزایش دمای گاز اطراف ذره، زمان سوزش کاهش می‌یابد.



شکل ۳- زمان سوزش تک ذره آلومینیوم بر حسب قطر ذره وقتی دمای هوای اطراف در ۱۵۰۰ کلوین است.

این اختلاف که میان نتایج تئوری و تجربی مشاهده می‌شود بدین دلیل است که فرض کردیم ذره بصورت کامل می‌سوزد

و قطر ذره در نهایت به صفر می‌رسد. در صورتیکه بسیاری از محققین، خرد شدن Al در حال سوزش را مشاهده کرده‌اند که این امر بیانگر این بوده است که در لحظه‌های آخر سوزش، کلاهک اکسیدی باقیمانده بصورت سختی می‌شکند و در نهایت ذره باقیمانده را به چند قسمت تقسیم می‌نماید [۶].

۴- نتیجه گیری

در این مقاله یک رابطه تحلیلی برای زمان سوزش تک ذره آلومینیوم بر حسب قطر ذره و دمای گاز اطراف در رژیم‌های مختلف انتقال حرارت ارائه شد. نتایج نشان می‌دهند که با کاهش قطر ذره، زمان سوزش کاهش می‌یابد. همچنین با افزایش دمای محیط، زمان سوزش کمتر می‌شود. نتایج نشان می‌دهند که برای نانو ذره آلومینیوم با در نظر گرفتن فرایند انتقال حرارت در رژیم آزاد مولکولی مطابقت خوبی بین نتایج تئوری و تجربی برقرار است. مزیت مدل ارائه شده در اینجا این است که زمان سوزش نانو ذره آلومینیوم را در دماهای متفاوت محاسبه می‌کند و محدودیت‌های مدل قبلی را ندارد.

مراجع

- 1- P. Escot Bocanegra, D. Davidenko, V. Sarou-Kanian, C. Chauveau, " Experimental and numerical studeis on the burning of aluminum micro and nanoparticle clouds in air ", Experimental thermal and fluid science, 34, 299-307, 2010.
- 2- Ying Huang, Grant A. Risha, Vigor Yang, Richard A. Yetter, " Combustion of bimodal nano/micron-sized aluminum particle cloud in air ", Proceeding of the combustion institute, 31, 2001-2009, 2007.
- 3- J. Bouillard, A. Vicens, O. Dufaud, L. Perrin, D. Thomas, " ignition and explosion risks of nanopowders ", Journal of Hazardous Materials, 181, 873-880, 2010.
- 4- Tran X. Phouc, Ruey-Hung Chen, " modeling the effect of particle size on the activation energy and ignition temperature of metallic nanoparticles ", Combustion and Flame, 159, 416-419, 2012.
- 5- P. Escot Bocanegra, Études expérimentales et modélisation de la combustion des nuages de particules micrométriques et nanométriques d'aluminium, Thèse de doctorat, Univ. d'Orléans, 2007.
- ۶- صدیقی، م، " تحلیل مکانیزم انتشار شعله ذرات ریز جامد "، پایان نامه دکترای مهندسی مکانیک (تبدیل انرژی)، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه علم و صنعت ایران، شهریور ۱۳۸۴.