



## پایلوت نیمه صنعتی اکسیدایون حرارتی و مدل سازی با استفاده از نرم افزار Fluent

حامد مرشدی بفرویی\*<sup>۱</sup>، محمد حقیقی<sup>۲</sup>، سعید وثوق محمودی<sup>۳</sup>

دانشگاه صنعتی سهند، دانشکده مهندسی شیمی، مرکز تحقیقات راکتور و کاتالیست

(hamed.morshedi@gmail.com \*)

### چکیده

یکی از مشکلات زیست محیطی که در صنایع نفت، گاز و پتروشیمی وجود دارد انتشار ترکیبات آلاینده آلی فرار (Volatile Organic Compounds) به جو زمین است. این ترکیبات دارای تأثیرات زیست محیطی مخرب بوده و اثر گلخانه‌ای را تشدید می‌کنند. برای حذف این آلاینده‌ها، پایلوت نیمه صنعتی اکسیدکننده حرارتی (Thermal Oxidizer Incinerator) ساخته شده است. در این پایلوت ترکیبات VOCs به  $\text{CO}_2$  و  $\text{H}_2\text{O}$  اکسید می‌شوند. برای بررسی و شبیه‌سازی معادلات مومنتوم، انتقال حرارت، انتقال جرم و پیشرفت واکنش‌های شیمیایی، از یک مدل‌سازی دو بعدی عددی به وسیله نرم افزار CFD، Fluent 6.3 استفاده شده است. در این راستا توزیع دما در جهت‌های طولی و شعاعی کوره و همچنین تغییرات دمایی در دی‌های متفاوت خوراک ورودی به کوره شامل هوا و گاز طبیعی به وسیله مدل‌سازی مورد بررسی قرار گرفته است. بدین منظور در ابتدا مدل با نتایج آزمایشگاهی حاصل از پایلوت نیمه صنعتی مقایسه گردیده است و در ادامه توزیع سرعت، نوع جریان و دما در نقاط مختلف و شکل شعله و تغییرات غلظت CO در اطراف شعله در دو بعد به صورت پایدار مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. در تمامی این موارد مطابقت خوبی مابین داده‌های تجربی و داده‌های حاصل از مدل‌سازی مشاهده شده است.

واژه‌های کلیدی: کوره اکسیدکننده حرارتی TOI - Fluent - ترکیبات آلاینده آلی فرار گازی (VOCs)

### ۱- مقدمه

یکی از رایج‌ترین روش‌های حذف ترکیبات آلاینده آلی فرار گازی VOCs استفاده از کوره‌های اکسیدکننده حرارتی TOI می‌باشد [۱-۴]. در این روش هوای ورودی تا دمای  $700-1000^\circ\text{C}$  گرم می‌شود و به مدت  $2/5-0/5$  ثانیه در داخل محفظه احتراق (Combustion Chamber) قرار می‌گیرد تا اکسیداسیون کامل ترکیبات VOCs به  $\text{CO}_2$  و  $\text{H}_2\text{O}$  روی دهد [۴، ۵]. در حالت عملی، بازدهی حذف  $95-99/99\%$  با استفاده از این روش گزارش شده است [6]. در بیشتر موارد غلظت ترکیبات VOCs به اندازه‌ای که انرژی لازم را برای گرم کردن جریان هوای داخل اکسیدکننده حرارتی فراهم کند، نمی‌باشد. بنابراین یک مشعل که با گاز طبیعی تغذیه می‌شود برای تامین این انرژی به کار می‌رود.

هر چه مصرف سوخت در مشعل کمتر شود، هزینه حذف ترکیبات VOCs و مقدار  $\text{CO}_2$  تولیدی کاهش می‌یابد. اما با کاهش زیاد دمای واکنش در محفظه احتراق، بازدهی سرعت حذف ترکیبات VOCs (Destruction Rate Efficiency) کاهش می‌یابد و غلظت هیدروکربن‌های نسوخته (Total Hydrocarbons) در خروجی کوره افزایش می‌یابد. کارکرد در دماهای احتراق پایین، باعث افزایش غلظت CO در خروجی کوره می‌شود. در ضمن یکی از نقش‌های مشعل تضمین احتراق پایدار و پیوسته ترکیبات VOCs می‌باشد که بدین منظور از شعله با دمای  $1000-2000^\circ\text{C}$  استفاده می‌شود [7].

برای به دست آوردن توزیع دما و سرعت در کل کوره به خصوص در نزدیکی مشعل کوره، مدل‌سازی به کمک نرم‌افزار

<sup>۱</sup> دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعتی سهند، دانشکده مهندسی شیمی، مرکز تحقیقات راکتور و کاتالیست

<sup>۲</sup> استادیار، دانشگاه صنعتی سهند، دانشکده مهندسی شیمی، مرکز تحقیقات راکتور و کاتالیست

<sup>۳</sup> دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعتی سهند، دانشکده مهندسی شیمی، مرکز تحقیقات راکتور و کاتالیست

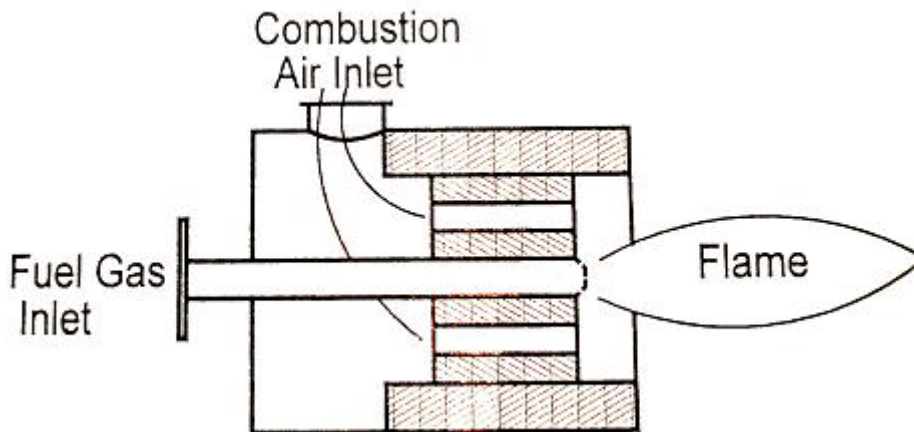
CFD, Fluent6.3 انجام شده است تا مکمل روش تجربی بوده و هزینه‌های مربوط به کارهای آزمایشگاهی را کاهش دهد. در این مقاله داده‌های دمایی تجربی حاصل از دبی‌های متفاوت خوراک شامل گاز طبیعی- هوا و داده‌های دمایی تجربی بدست آمده در طول کوره و در جهت شعاعی نیز با داده‌های حاصل از مدل‌سازی مقایسه شده است. در پایان نتایج حاصل از مدل‌سازی به کمک نرم‌افزار Fluent 6.3 در مختصات دو بعدی برای توزیع دما، توزیع سرعت، میزان آشفستگی و شکل شعله مورد بررسی قرار گرفته است.

## ۲- طراحی و ساخت پایلوت

اکسیدکننده‌های حرارتی از چندین جزء اصلی تشکیل شده‌اند که عبارتند از مشعل، محفظه احتراق، عایق حرارتی و دودکش [۸]. مشعل، شعله دما بالا را به وسیله احتراق سوخت کمکی از قبیل گاز طبیعی یا از طریق یک هوای آلوده غنی از ترکیبات VOCs به شرطی که ارزش حرارتی آن تزریقش را از طریق مشعل تضمین کند، ایجاد می‌کند. محفظه اقامت- احتراق زمان کافی را برای تکمیل واکنش‌های احتراق فراهم می‌کند. عایق حرارتی از فلز بدنه در مقابل گازهای دما بالای موجود در محفظه احتراق محافظت می‌کند.

### ۱-۲ مشعل

نوع مشعل انتخاب شده (Nozzle Mix Burner) می‌باشد. مهمترین مشخصه این مشعل جداسازی گازهای سوختی و عامل اکسیدکننده است تا زمانی که هر دو از اریفس‌های مشعل خارج شوند و بعد از احتراق در گلوگاه مشعل تشکیل شعله دهند. نمایی از این مشعل در شکل ۱ نشان داده شده است [۹].



شکل ۱. مشعل از نوع NMB [۹]

### ۲-۲ محفظه احتراق

احتراق یکی از انواع واکنش‌های شیمیایی است که در آن محصولات واکنش‌های شیمیایی به وسیله این دو قانون کنترل می‌شوند:

- تعادل شیمیایی
- سینتیک واکنش

تعادل شیمیایی محصولات واکنش را با این فرض که واکنش‌دهنده‌ها به مدت زمان بی‌نهایت در کنار هم قرار دارند،

تعریف می‌کند.

سینتیک واکنش، بدون تغییر در محصولات واکنش، بازه زمانی را که واکنش دهنده‌ها باید با هم در تماس باشند تا درصد معینی از پیشرفت واکنش اتفاق بیافتد، مشخص می‌کند. محفظه احتراق در اکسیدکننده حرارتی، واکنش دهنده‌ها را در بازه زمانی کافی در تماس با هم قرار می‌دهد تا شرایط سینتیک شیمیایی اعمال شود و به یک درجه بالایی از تبدیل دست یابیم.

محفظه اقامت بخشی از اکسیدکننده حرارتی می‌باشد که در پایین دست مشعل و قسمت تزریق گازهای آلوده قرار دارد. این قسمت پیش از آنکه همه واکنش دهنده‌ها داخل محفظه احتراق تزریق شده و به طور کامل مخلوط شوند شروع نمی‌شود. در پایلوت ساخته شده محفظه احتراق استوانه‌ای بوده با مشخصات قطر داخلی ۱۰cm و طول ۱۳۰cm، که قابلیت نمونه‌گیری‌های دمایی و گرمی را در طول‌های مختلف دارا می‌باشد. شکل ۲ بخش‌های گوناگون یک اکسیدکننده حرارتی را نشان می‌دهد که شامل مشعل، محفظه احتراق، سیستم‌های اندازه‌گیری و دودکش می‌باشد.



شکل ۲. پایلوت ساخته شده به منظور بررسی عملکرد مشعل‌ها و کوره‌ها

در داخل محفظه احتراق، ضخامت ۷cm از سیمان نسوز به عنوان عایق حرارتی برای جلوگیری از اتلاف حرارتی به کار می‌رود. همچنین این عایق مانع از آسیب دیدگی جداره بیرونی (جداره بیرونی از استیل می‌باشد) نیز می‌شود تا به طور مستقیم در معرض شعله مشعل قرار نگیرد.

پارامترهای عملیاتی این کوره عبارت‌اند از:

- هوای ورودی
- هوای ورودی به محفظه احتراق دارای ترکیب گازهای آلوده بوده و ضمن اینکه اکسیژن لازم را برای سوزاندن گاز طبیعی در مشعل فراهم می‌کند ترکیبات سمی را نیز با خود حمل می‌نماید. محدوده دبی هوای ورودی تا  $16\text{m}^3/\text{h}$  است.
- گاز طبیعی ورودی
- برای گرم کردن محفظه احتراق تا دماهای بالاتر از  $700^\circ\text{C}$  از گاز طبیعی (NG) به عنوان سوخت کمکی استفاده می‌شود. این گاز به طور مستقیم وارد کوره شده و از طریق مشعل می‌سوزد و گرمای مورد نیاز را برای سوزاندن ترکیبات VOCs در داخل کوره فراهم می‌کند. دبی ورودی این گاز تا  $1\text{lit}/\text{min}$  است.



FCCI2010-2153

## سومین کنفرانس سوخت و احتراق ایران تهران - دانشگاه صنعتی امیرکبیر - اسفند ماه ۱۳۸۸



دانشگاه صنعتی امیرکبیر  
دانشکده مهندسی هوافضا

### ۳- روش مدل سازی

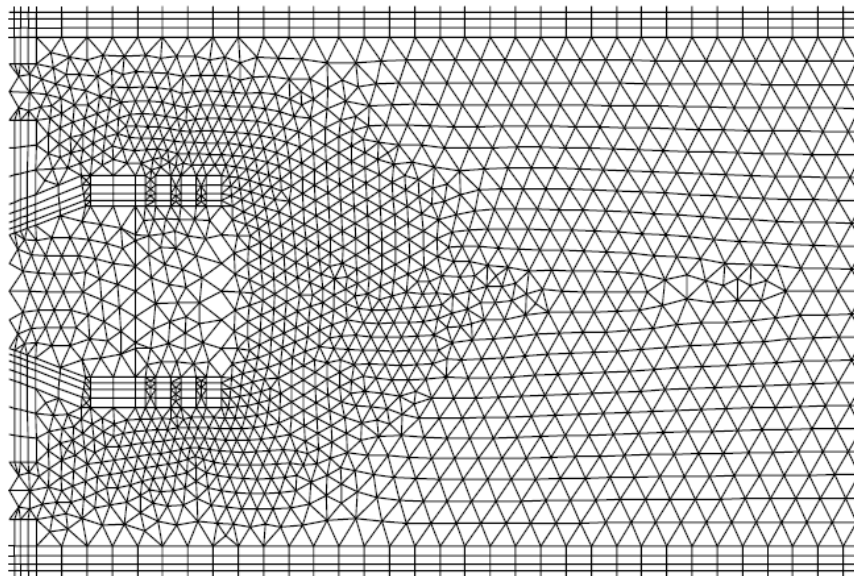
مدل سازی کوره های اکسیدکننده حرارتی (TOI) به دلیل امکان پیش بینی تاثیرات تغییر در شرایط ورودی بر روی بازدهی حذف، طراحی سیستم های کنترلی و نیز بررسی حالاتی که در عمل هزینه بالایی دارد، می تواند بسیار مفید و کاربردی باشد. در این مقاله یک مدل سازی عددی که جریان سیال، انتقال حرارت و واکنش های شیمیایی داخل محفظه احتراق را در نظر می گیرد به وسیله نرم افزار CFD، Fluent6.3 انجام شده است. در این روش برای بررسی دقت داده های مدل سازی، داده های تجربی به دست آمده از پایلوت نیمه صنعتی مورد استفاده قرار گرفته است.

### ۱-۳ جزئیات هندسی و شبکه بندی کوره

برای شبکه بندی مورد استفاده در مدل سازی پایلوت از نرم افزار Gambit استفاده شده است. هندسه شکل در دو بعد و شبکه بندی محیط TRI-Pave در نظر گرفته شده است. پارامترهای ثابت و عملیاتی بکار رفته برای شبیه سازی در محیط Fluent و Gambit در جدول ۱ داده شده است. نوع جریان و آشفتگی از معادله  $k-\epsilon$  استفاده شده است. نمونه ای از شبکه بندی مشعل کوره و پیرامون آن در شکل ۳ نشان داده شده است.

جدول ۱: پارامترهای ثابت و عملیاتی برای شبیه سازی

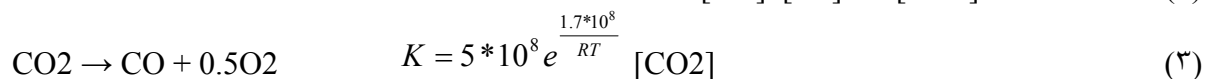
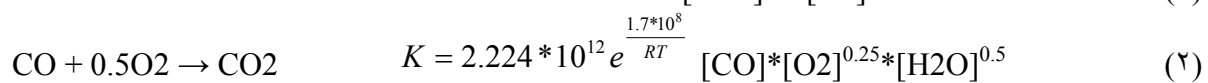
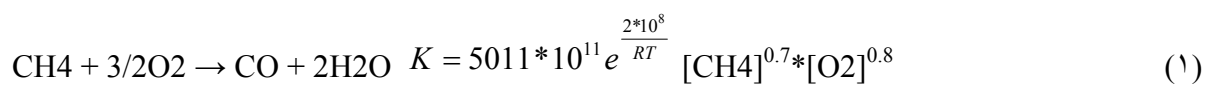
Operating Pressure(pascal)	۱۰۱۳۲۵
Gravitational Acceleration(m/s <sup>2</sup> )	-۹/۸۷۵
Operating Temperature(K)	۳۰۰
Turbulent Intensity(%)	۱۰
Turbulent Viscosity Ratio	۰/۰۱
Air Input Temperature(K)	۳۰۰
CH <sub>4</sub> Input Temperature(K)	۳۰۰
Heat Flux(w/m <sup>2</sup> )	۰
Mass Diffusivity(m <sup>2</sup> /s)	۲/۸۸*۱۰ <sup>-۵</sup>
Viscosity(kg/ms)	۱/۷۲*۱۰ <sup>-۵</sup>
Thermal Conductivity(w/mK)	۰/۰۴۵۴
Transition pattern	۱/۱
First row	۰/۱
Growth factor	۱/۲
Species model	Species transport



شکل ۳. شبکه بندی کوره حرارتی در اطراف مشعل با نرم افزار Gambit

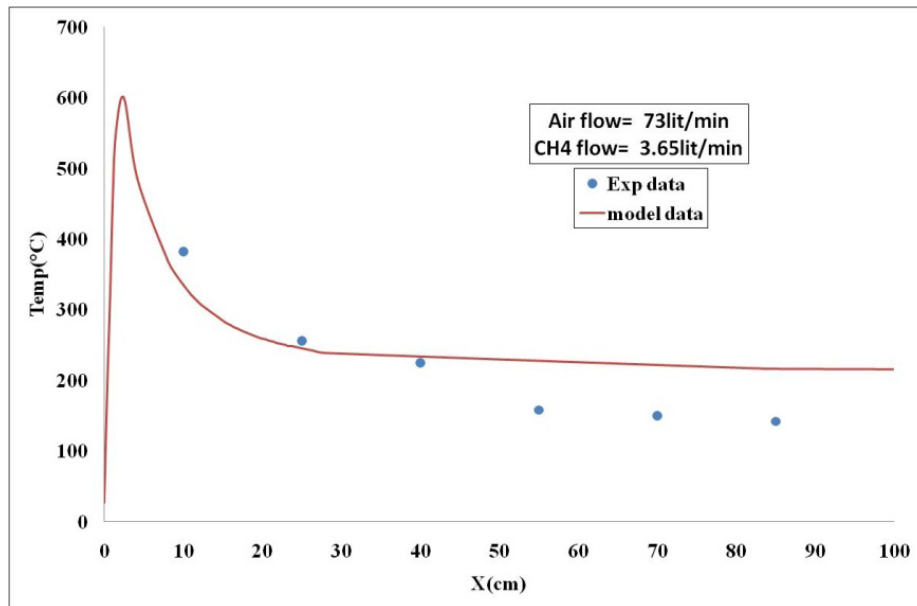
### ۲-۳ سینتیک واکنش شیمیایی

واکنش های مورد نیاز به منظور شبیه سازی که در زیر آورده شده است شامل تبدیل متان به منواکسید کربن و در ادامه، تبدیل آن به دی اکسید کربن است. در مدل سازی از eddy-reaction استفاده شده است. همانطور که در سینتیک ارائه شده مشهود است هرچند بخار آب در واکنش شرکت نمی کند، غلظت آن در میزان تبدیل CO به CO<sub>2</sub> نقش مهمی دارد. به همین دلیل در بیشتر فلرهای صنعتی از بخار آب به عنوان عامل کمکی و بهبوددهنده شرایط عملیاتی استفاده می شود [۱۰]. در این تحقیق، بخار آب موجود در سیستم، تنها حاصل بخار آب تولید شده از احتراق متان می باشد و بخار آبی به سیستم اضافه نشده است.



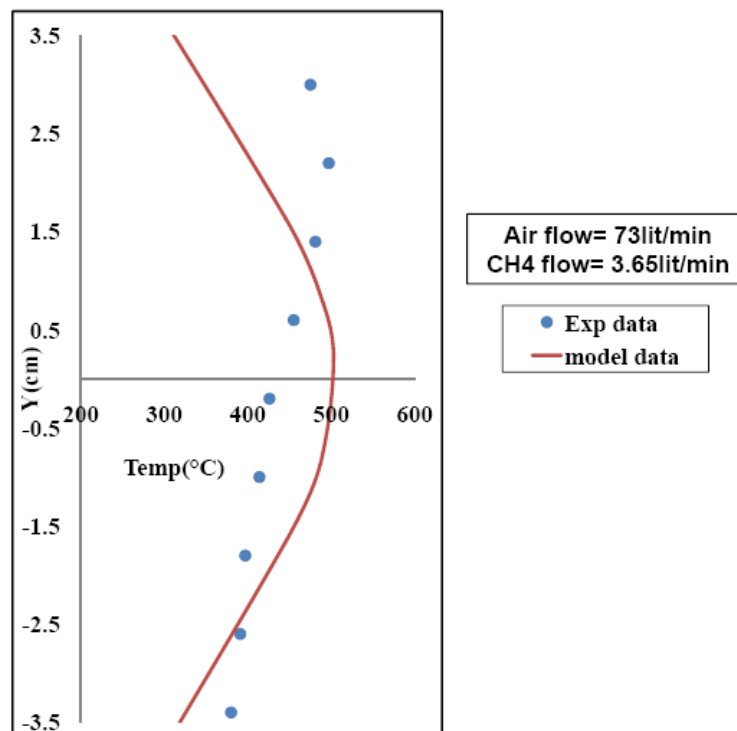
### ۴- مقایسه مقادیر مدل سازی با داده های آزمایشگاهی

جهت انتخاب مدل مناسب و نیز بررسی صحت و دقت شبیه سازی نیاز به بررسی داده ها با مقادیر آزمایشگاهی می باشد. برای این منظور، دماهای مرکز کوره در طول های مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصل در شکل ۴ مشاهده می شود.



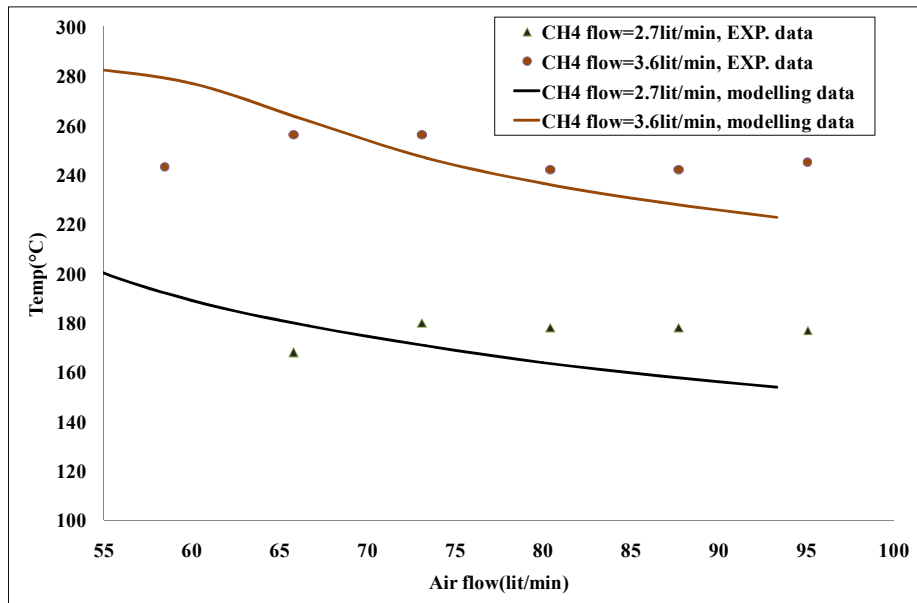
شکل ۴. توزیع محوری دما در طول کوره

به منظور بررسی دقت مدل، توزیع مناسب شکل شعله و نیز توزیع جریان، مدل در جهت شعاعی نیز با داده‌های آزمایشگاهی مقایسه شده است. و در این راستا، داده‌های دمایی در طول ثابت ۲۵cm و شعاع‌های مختلف مورد بررسی قرار گرفته است که نتایج حاصل در شکل ۵ آمده است. توزیع دما در ابتدای کوره به صورت سهموی می‌باشد و دما با افزایش شعاع کاهش یافته است و در دیواره کمترین دما مشاهده می‌شود.



شکل ۵. توزیع دما در طول ۲۵cm و شعاع‌های مختلف

یکی دیگر از فعالیت‌های مدل‌سازی انجام شده بدست آوردن توزیع دما در دبی‌های متفاوت خوراک ورودی شامل هوا و گاز متان در طول‌های متفاوت کوره می‌باشد. داده‌های حاصل از مدل‌سازی در این حالت هم تطابق نسبتاً خوبی با داده‌های تجربی دما داشته است. نتایج حاصل را در شکل ۶ مشاهده می‌کنید. با افزایش فاصله از مشعل دما در مرکز کوره کاهش یافته تا در مقدار مشخصی ثابت شود که در این حالت جریان به صورت Plug می‌باشد. مدل ارائه شده نیز به خوبی این رفتار را پیش‌بینی کرده است.

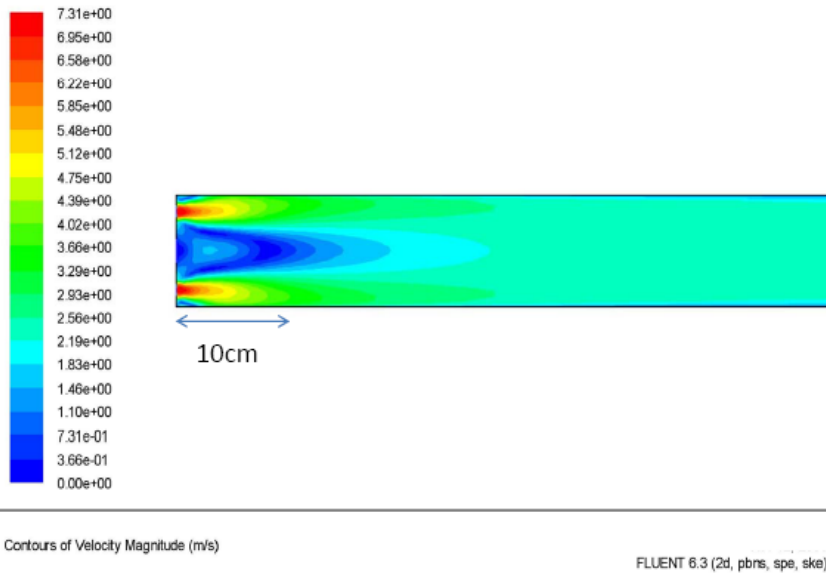


شکل ۶. توزیع دما در طول کوره در دبی‌های متفاوت هوا و گاز متان

همانطور که در شکل‌های ۴ و ۵ و ۶ مشاهده می‌شود مدل ارائه شده با داده‌های آزمایشگاهی که از پایلوت نیمه صنعتی به دست آمده، مطابقت قابل قبولی دارد و می‌توان از این مدل به منظور شبیه‌سازی کوره آزمایشگاهی با هدف بررسی توزیع جریان و توزیع دمایی کوره استفاده نمود.

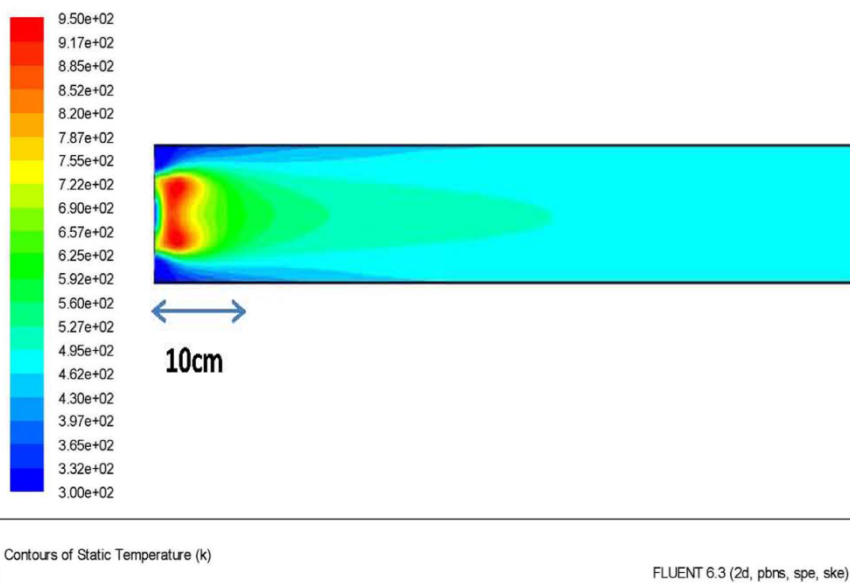
## ۵- نتایج و بحث

در ابتدا با کمک نرم‌افزار Fluent توزیع سرعت و نوع جریان در کوره‌ها مورد بررسی قرار گرفته است که در شکل ۷ آورده شده است.



شکل ۷. توزیع سرعت و جریان در طول کوره

همانطور که مشاهده می‌شود در ابتدای کوره جریان ناهمگن است که با افزایش طول کوره به ۳۰cm جریان به سمت Plug رفته و به صورت همگن در کوره حرکت می‌کند که باعث یکنواختی واکنش در جهت شعاع کوره می‌شود. برای بررسی دما در کوره واکنش دو مرحله‌ای سوختن متان در نظر گرفته می‌شود که نتایج حاصل از آن در شکل ۸ آورده شده است.

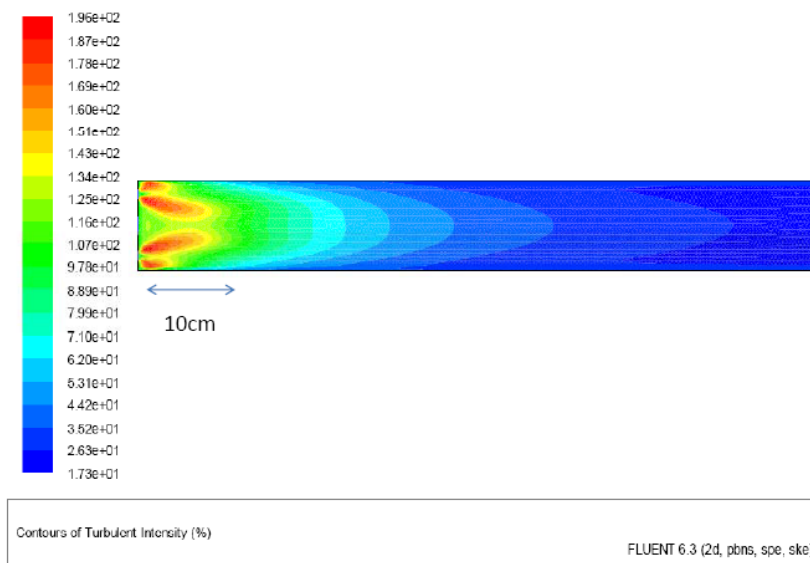


شکل ۸. توزیع دمایی در طول کوره



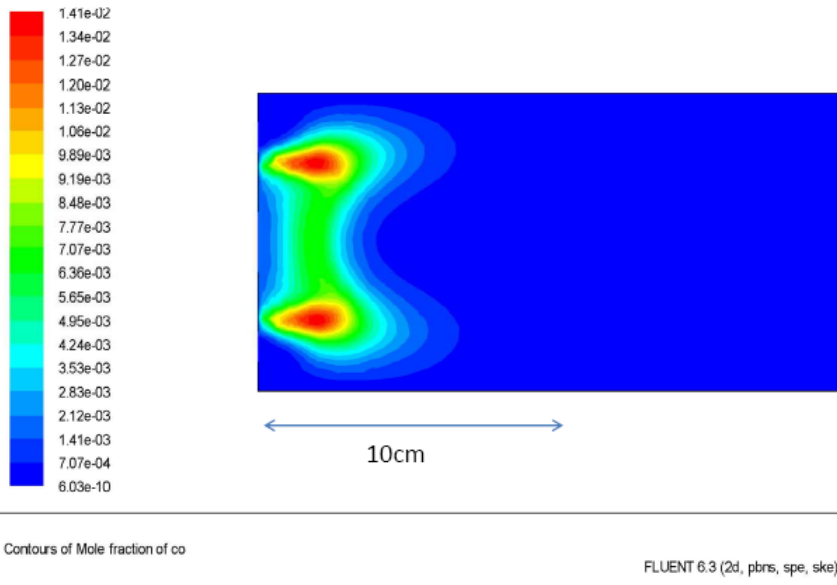
به دلیل غلظت پایین متان ورودی، دما در نزدیکی شعله بالاتر از ۹۰۰K است ولی در بالک سیال دما در حدود ۵۰۰K می‌باشد که با افزایش نسبت متان به هوا، دما در کوره افزایش یافته تا جایی که واکنش کامل سوختن به دلیل کمبود هوا انجام نمی‌شود و دمای کوره کاهش می‌یابد.

به منظور بررسی میزان تلاطم گازها در کوره‌ها از شدت آشفتگی جریان (Turbulent Intensity) استفاده می‌شود که مقادیر بالاتر از ۱۰٪ نشان‌دهنده جریان آشفته و در کمتر از آن جریان به صورت آرام می‌باشد. در شکل ۹ شدت آشفتگی جریان نمایش داده شده است که در اطراف مشعل جریان بسیار آشفته بوده و به سمت انتهای کوره، جریان به حالت آرام نزدیکتر می‌شود.

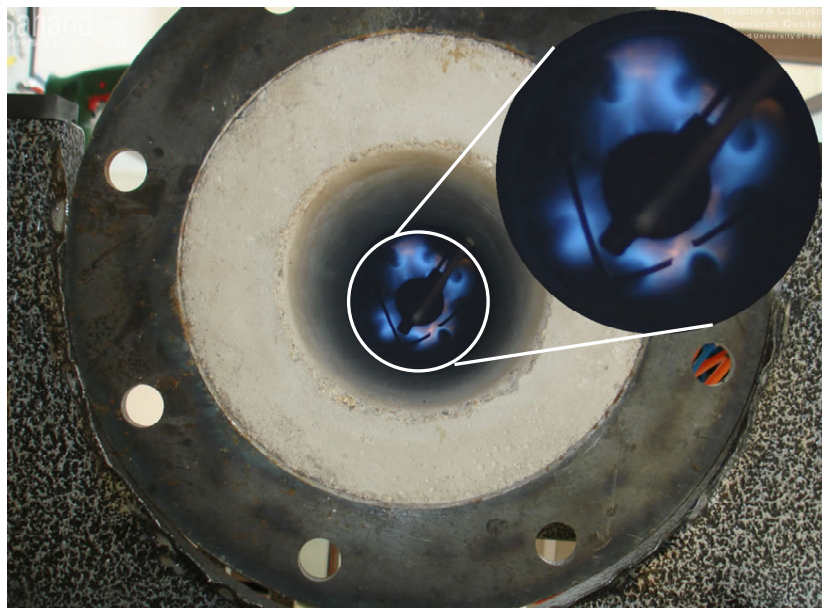


شکل ۹. تغییرات آشفتگی جریان در طول کوره

برای افزایش شدت آشفتگی و طول شعله نیاز به وارد کردن مقادیر بیشتر گاز متان می‌باشد که به دلیل افزایش مصرف گاز طبیعی و در نتیجه افزایش هزینه‌های جاری چندان مقرون به صرفه نمی‌باشد. برای بررسی نوع شعله نیاز به یک معرف است که بدین منظور از غلظت CO به عنوان شاخص استفاده شده است. در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ شکل شعله حاصل از مدل و مشاهدات تجربی آورده شده است.



شکل ۱۰. تغییرات غلظت CO در اطراف مشعل کوره



شکل ۱۱. نمایی از شکل عکسبرداری شده از مشعل کوره

همانطور که در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ مشاهده می‌شود با توزیع مناسب شعله در ورودی کوره، امکان پوشش کامل دما بالا در ورودی کوره به صورت تقریباً کاملی داده شده و در نتیجه احتمال وجود نقاط سرد و نیز خروج آلاینده به صورت نسوخته یا نیم‌سوخته کم می‌باشد که در این صورت نیاز به استفاده از متان به مقدار زیاد به منظور افزایش دمای کوره نیز برطرف می‌شود و در نتیجه مصرف سوخت بهینه می‌باشد. البته باید در نظر داشت که کاهش زیاد متان نیز باعث کاهش دما و حذف آلاینده‌های آلی می‌شود.



## ۶- نتیجه‌گیری و پیشنهادات

به منظور رفع مشکلات زیست‌محیطی واحدهای صنعتی که گازهای آلی فرار (VOCs) را وارد جو می‌کنند کوره اکسیدکننده حرارتی (TOI) حذف‌کننده آلاینده‌های گازی ساخته شده است. در این راستا شبیه‌سازی جامعی با استفاده از نرم‌افزار CFD، Fluent6.3، به منظور شبیه‌سازی واحدهایی که با پدیده‌های انتقال همراه با واکنش‌های شیمیایی همراه است انجام شده است. به این منظور، از واکنش‌های چند مرحله‌ای سوختن متان استفاده شده است که باعث مدل‌سازی مناسب کوره‌ها و دستیابی به مدلی منطبق بر واقعیت دارد. داده‌های تجربی دمایی بدست آمده در کوره حرارتی که شامل داده‌های طولی، شعاعی و داده‌های دمایی حاصل از تغییر دبی خوراک ورودی شامل هوا - گاز طبیعی می‌باشد با استفاده از شبیه‌سازی با نرم‌افزار Fluent مورد بررسی قرار گرفته و تطابق کاملی مابین داده‌های آزمایشگاهی و داده‌های حاصل از شبیه‌سازی مشاهده می‌شود. در مراحل بعدی شبیه‌سازی، تاثیر آشفستگی جریان در کوره و شکل شعله نیز مورد بررسی قرار گرفته است که در این مورد هم سازگاری با داده‌های تجربی مشاهده می‌شود. از دیگر فعالیت‌های قابل انجام، بهینه‌سازی این کوره‌ها با کاهش مصرف گاز طبیعی همراه با کاهش غلظت آلاینده‌های خروجی می‌باشد. در ادامه گسترش مدل به واحدهای صنعتی و نیز بررسی سینتیکی سوختن مواد آلاینده مانند بنزن و تولوئن با کمک این مدل، تخمین غلظت خروجی آلاینده‌ها (THC, CO, NOX) در پایلوت نیمه صنعتی و مشابه آن در کوره‌های صنعتی از جمله کارهایی است که در این راستا می‌تواند پیشنهاد شود.

## مراجع

- [۱] Strosher, M., " Investigations of flare gas emissions in Alberta", Report to Environment Canada, the Alberta Energy and Utilities Board and the Canadian Association of Petroleum Producers. Environmental Technologies, Alberta Research Council, Calgary, Alberta Vol. 117, 1996
- [۲] Rightley, M.L., and F.A. Williams, " Burning velocities of CO flames", Combustion and Flame Vol. 110, No. 3, 1997, pp. 285-297.
- [۳] Salvador, S., Y. Kara, and J.M. Commandré, " Reduction of NO emissions from a VOC recuperative incinerator by dilution of the fuel supply", Applied Thermal Engineering Vol. 24, No. 2-3, 2004, pp. 245-254.
- [۴] Butler, R.G., and I. Glassman, " Cyclopentadiene combustion in a plug flow reactor near 1150 K", Proceedings of the Combustion Institute Vol. 32 No. 1, 2009 pp. 395-402.
- [۵] Choi, B.S., and J. Yi, " Simulation and optimization on the regenerative thermal oxidation of volatile organic compounds", Chemical Engineering Journal Vol. 76, No. 2, 2000, pp. 103-114.
- [۶] Salvador, S., J.M. Commandré, and Y. Kara, " Thermal recuperative incineration of VOCs: CFD modelling and experimental validation", Applied Thermal Engineering Vol. 26, No. 17-18, 2006, pp. 2355-2366
- [۷] Dryer, F.L., and I. Glassman, " High-temperature oxidation of CO and CH<sub>4</sub>", Symposium) International) on Combustion Vol. 14, No. 1, 1973, pp 987-1003
- [۸] Salvador, S., Y. Kara, and J.M. Crussol, " Improving VOC recuperative incinerators performances by increasing turbulence levels inside the combustion chamber--experimental results", Applied Thermal Engineering Vol. 25, No. 13, 2005, pp. 1871-1881
- [۹] Lewandowski, D.A., Design of thermal oxidation systems for volatile organic compounds: CRC, 1999.
- [۱۰] Stone, D.K., " Susan K. Lynch Richard F. Pandullo Radian Corporation Research Triangle Park, NC 27709", 1995