



شبیهسازی سه بعدی پنل تشعشعی کاتالیستی با فرض برابری شروود و ناسلت روی سطح پنل

سید مصطفی حسینعلی پور^{(*}، مسعود مددالهی^۲، آروین بهروان^۳، محمدمهدی نمازی^۴ تهران، خیابان هنگام، دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی مکانیک، مرکز CAE و آزمایشگاه CFD (* نویسنده مخاطب:alipour@iust.ac.ir)

چکیدہ

در تحقیق حاضر به منظور مطالعه عملکرد پنلهای تشعشعی کاتالیستی، یک مدل عددی سه بعدی از یک پنل تجاری تولید شده است. در شبیهسازی سه بعدی و پایای پنل، معادلات بقای مومنتم در محیط متخلخل و غیر متخلخل، معادله بقای انرژی و معادله بقای گونهها به روش المان محدود حل شدهاند. به منظور استخراج شرایط مرزی مناسب برای معادله انرژی در سطح جلویی پنل، جریان سیال عبوری روی یک سطح متخلخل مدلسازی شده و نشان داده شد که میتوان از روابط تجربی جابجایی طبیعی روی یک سطح عمودی استفاده نمود. همچنین به منظور تعیین شرط مرزی معادله بقای گونهها بر روی سطح کاتالیست، از فرض برابری عدد ناسلت و شروود استفاده شده است. در این پژوهش نشان داده شد که نفوذ اکسیژن از سمت مقابل پنل به لایه کاتالیستی به عنوان عامل محدودکننده در فرآیند احتراق کاتالیستی می-باشد. همچنین شرایط مرزی روی سطح پنل و نیز ضرایب نرخ احتراق نسبت به مطالعات پیشین موجود در ادبیات فن متصحیح گردید. جهت اعتبارسنجی مدل عددی از مقادیر اندازه گیری شده دمای سطح و بازده احتراق یک نمونه تجاری از مشعل های تشعشعی کاتالیستی استفاده شده است. نتایج مدلسازی سازگاری خوبی با نتایج اندازه گیری شده نشان داده مشعل های تشعشعی کاتالیستی استفاده شده است. نتایج مدلسازی ساز گاری خوبی با نتایج اندازه گیری شده نشان داد، مشعل های تشعشعی کاتالیستی استفاده شده است. نتایج مدلسازی سازگاری خوبی با نتایج اندازه گیری شده نشان داد، اعتبار سنجی نیزده احتراق بد صاح و ناز مدان زمان با خطایی برابر با ۲۰٪ ندازه گیری گردید.

واژههای کلیدی: مشعل تشعشعی کاتالیستی- شبیه سازی عددی- انتقال حرارت- محیط متخلخل- نفوذ اکسیژن

۱– مقدمه

در احتراق کاتالیستی با استفاده از کاتالیست فلزات نجیب مانند پلاتینوم و پالادیوم در یک محیط متخلخل می توان با کاهش انرژی فعال سازی واکنش، دمای حاصل از فرآیند احتراق را کاهش داد. کاهش دما منجر به عدم تولید آلایندههایی نظیر NOx و کارکرد پاک این مشعلها می شود. واکنش احتراق کاتالیستی بدون شعله در مشعلهای تشعشعی باعث تولید انرژی تابشی از سطح مشعل می گردد. در شکل ۱ اجزاء مختلف یک مشعل تشعشعی کاتالیستی نمایش داده شده است. گاز طبیعی پس از عبور از یک اوریفیس، از پشت مشعل وارد سیستم شده و بعد از عبور از دو لایه عایق که هم نقش پخش کننده سوخت را دارند و هم از اتلاف انرژی از قسمت پشت مشعل جلوگیری می نماید، به لایه کاتالیستی می رسد. اکسیژن نیز از سمت مقابل مشعل بعد از عبور از لایه مرزی ایجاد شده روی کاتالیست، به داخل آن نفوذ کرده و با سوخت واکنش می دهد. المنت الکتریکی نقش تامین کننده انرژی فعال سازی را دارد و بعد از شروع واکنش از مدار خارج می گردد.

> – دانشیار، دانشگاه علم و صنعت ایران ۲– دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشگاه علم و صنعت ایران ۳– دانشجوی دکتری، دانشگاه علم و صنعت ایران ۴– دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشگاه علم و صنعت ایران

پنجمین کنفرانس سوخت و احتراق ایران



تهران - دانشگاه علم و صنعت ایران - بهمن ماه ۱۳۹۲



احتراق کاتالیستی برای اولین بار توسط آزمایشات دیوی (Davy) کشف شد. در آزمایش وی نشان داده شد که رشتههای پلاتین میتوانند مخلوط قابل اشتعال سوخت و هوا را بدون شعله و با مقدار قابل توجهی شار تشعشعی از سطوح داغ کاتالیست محترق نمایند[۱]. در مطالعه بعدی واکنش اکسیداسیون متان روی کاتالیست پلاتینیوم بر پایه فیبر آلومینا در یک مشعل کاتالیست محترق نمایند[۱]. در مطالعه بعدی واکنش اکسیداسیون متان روی کاتالیست پلاتینیوم بر پایه فیبر آلومینا در یک مشعل کاتالیست پلاتینیوم بر پایه فیبر آلومینا در یک مشعل کاتالیست محترق نمایند[۱]. در مطالعه بعدی واکنش اکسیداسیون متان روی کاتالیست پلاتینیوم بر پایه فیبر آلومینا در یک مشعل کاتالیست والیست پلاتینیوم بر پایه فیبر آلومینا در یک مشعل کاتالیست وسط تریم (Trimm) و لام (Lam) به صورت تجربی ارزیابی گردید. در مطالعه آنها، دیاکسید کربن و آب تنها محصولات قابل ردیابی واکنش بودند[۲]. ایشان سپس مدل یکبعدی مشعل مذکور را نیز مورد بررسی قرار داده و مشاهده نمودند که تولید حرارت به نرخ واکنش شیمیایی وابسته است و افزایش در نرخ متان ورودی ممکن است موجب افزایش نرخ واکنش در اثر افزایش در اثر محدودیت نفوذ هوا به داخل پد و یا افزایش لغزش متان در اثر کاهش زمان در اثر افزایش در اثر محدودیت نفوذ هوا به داخل پد و یا افزایش لغزش متان در اثر افزایش در اثر افزایش در اثر افزایش دان میان در اثر محدودیت نفوذ هوا به داخل پد و یا افزایش لغزش متان در اثر کاهش زمان تماس با سطح کاتالیست گردد[۳].



شکل ۱- اجزای مختلف یک مشعل تشعشعی کاتالیستی

ابلو(Ablow) و ساداموری(Sadamori) به منظور مطالعه جریان پایا در یک مشعل احتراق کاتالیستی یک مدل تحلیلی ارائه نمودند. مدل به دست آمده، تنها وابستگی ضرایب انتقال به دما را در نظر گرفته و از وابستگی آنها به غلظت گونهها صرف نظر کرده بود. همچنین در این مدلسازی، جابجایی طبیعی روی سطح مشعل با روش اختلاف محدود پیادهسازی شد. نتایج به دست آمده در قسمت پروفیلهای دمایی تطابق خوبی با نتایج تجربی نشان داده ولی نتایج مربوط به غلظت گونهها چندان دقیق گزارش نشد[۴]. در مطالعه دیگری که توسط هیس (Hayes) و جدیری (Jodeiri) انجام گرفت، یک مشعل تشعشعی کاتالیستی با استفاده از روش المان محدود شبیهسازی شد. در مطالعه ایشان، برای بررسی احتراق در مشعل، از سینتیک کلی استخراج شده توسط تریم ولام استفاده شد[۵]. مطالعه مذکور اولین شبیهسازی دوبعدی مشعلهای تشعشعی میباشد که با اشکالاتی همراه بوده که در مطالعه حاضر تلاش شده است، تا برخی از آنها اصلاح گردد.

در تحقیق حاضر به بررسی عملکرد مشعل تشعشعی کاتالیستی نفوذ متقابل پرداخته شده است. مدل ایجاد شده به صورت مرحله به مرحله گسترش داده شده است. ابتدا برای اعمال شرایط مرزی مناسب روی سطح خروجی مشعل، نسبت به استخراج معادله مناسب برای ضریب انتقال حرارت طبیعی و انتقال جرم اقدام به عمل آمد. بدین منظور جریان و انتقال حرارت هوای عبوری از روی یک صفحه متخلخل با در نظر گرفتن خروج محصولات احتراق مورد بررسی قرار گرفت. در ادامه نسبت به هوای عبوری از روی یک صفحه متغل، قرار گرفتن خروج محصولات احتراق مورد بررسی قرار گرفت. در ادامه نسبت به موای عبوری از روی یک صفحه متخلخل با در نظر گرفتن خروج محصولات احتراق مورد بررسی قرار گرفت. در ادامه نسبت به تولید مدل نهایی سه بعدی مشعل آمد. به عمل آمد. منطور جریان و انتقال حرارت معاید به عمل آمد. بدین منظور میان و انتقال حرارت معای عبوری از روی یک صفحه متخلخل با در نظر گرفتن خروج محصولات احتراق مورد بررسی قرار گرفت. در ادامه نسبت به عوای عبوری از روی یک صفحه متخلخل با در نظر گرفتن خروج محصولات احتراق مورد برسی قرار گرفت. در ادامه نسبت به عموای عبوری از روی یک صفحه متخلخل با در نظر گرفتن خروج محصولات احتراق مود برسی قرار گرفت. در ادامه نسبت به عموای عبوری از روی یک صفحه متخلخل با در نظر گرفتن خروج محصولات احتراق مورد برسی قرار مراح گرفت. در ادامه نسبت به عموای عبوری از معای معای مسیعی کاتالیستی با استفاده از نرم افزار کامسول (2013) عمدی مشعل تشعشعی کاتالیستی با استفاده از مور المان محدود اقدام به عمل آمد. به منظور مطالعه نحوه



ينجمين كنفرانس سوخت واحتراق ايران تهران - دانشگاه علم و صنعت ایران - بهمن ماه ۱۳۹۲



عملکرد مشعل تشعشعی کاتالیستی، یک نمونه تجاری از این سیستمها جهت مدلسازی عددی و اندازهگیری تجربی دمای سطح و بازده احتراق خریداری شد. مشعل مورد استفاده در این پژوهش، دارای مشخصات مندرج در جدول ۱ میباشد.

•••••	•••
توضيحات	پارامتر
WX12X24	مدل
۱۰۰۰۰ BTUH	ظرفيت مشعل
IT V	ولتاژ راەاندازى
۳۰А	جريان الكتريكي مورد نياز
گاز طبیعی	سوخت مصرفى
$\boldsymbol{\cdot} / \boldsymbol{\cdot} \boldsymbol{\forall} \boldsymbol{\lambda} {\times} \boldsymbol{\cdot} / \boldsymbol{\nabla} {\times} \boldsymbol{\cdot} / \boldsymbol{\varUpsilon} m^3$	ابعاد کلی مشعل
۴/۹۳ lit/min	دبی سوخت ورودی

جدول ۱- مشخصات مشعل تشعشعی تجاری

۲- معادلات حاکم

۲-۱- معادله حاکم بر جریان سیال

با توجه به ساختار مشعلهای تشعشعی کاتالیستی، سیال در داخل مشعل در دو محیط متخلخل و غیرمتخلخل و به صورت آرام جاری میشود. معادله جریان حاکم در محیط غیر متخلخل معادله ناویر استوکس^۱ به صورت (۱) بوده و معادلهای که جهت تخمین رفتار سیال در محیط متخلخل به کار برده شده است، معادله برینکمن^۲ است که توسعه یافته معادله دارسی در محیطهای متخلخل میباشد و به صورت (۲) بیان میشود.

$$\nabla [-pI + \sim (\nabla u + (\nabla u)^T)] - \dots (u \cdot \nabla)u = 0$$
⁽¹⁾

$$\nabla [-pI + \frac{\tilde{}}{4} (\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2\tilde{}}{34} (\nabla u)I] - \frac{\tilde{}}{v_p} u = 0$$
(7)

به منظور محاسبه ویسکوزیته مخلوطهای چندجزئی از تئوری چپمن-انسکاگ^۳ به صورت رابطه (۳) استفاده شده است.

$$\sim_{m} = \sum_{i=1}^{n} \frac{y_{i} \sim_{i}}{\sum_{j=1}^{n} y_{i} \times \{_{ij}\}}$$
(7)

روشهای مختلفی برای تخمین پارامتر _{ii} } وجود دارد. در اینجا از روش تقریب وایک[†] استفاده می گردد. وایک با استفاده از تئوری سینتیک سادرلند⁶ به نتیجه زیر رسید.

$$I_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\tilde{i}_{i}}{\tilde{j}_{j}}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_{j}}{M_{i}}\right)^{\frac{1}{4}}\right]^{2}}{\left[8 \times \left(1 + \frac{M_{i}}{M_{j}}\right)\right]^{\frac{1}{2}}}$$
(*)

¹ Navier-Stokes equations

² Brinkman

³ Chapman-Enskog

⁴ Wilke's Approximation

⁵ Sutherland's Kinetic theory



تهران - دانشگاه علم و صنعت ایران - بهمن ماه ۱۳۹۲



۲-۲- معادله بقای انرژی

به منظور بررسی انتقال حرارت در مشعل تشعشعی می بایست معادله انرژی را در محیط متخلخل و غیرمتخلخل حل نمود. محیط متخلخل در این پژوهش به صورت همگن و ایزوتروپ فرض شده و از اثرات تشعشع در آن صرف نظر گردیده است. همچنین فرض شده است که در محیط متخلخل تعادل حرارتی محلی[⁽] وجود دارد به طوری که دمای فازهای جامد و سیال با هم برابر هستند. با توجه به این فرضیات معادله بقای انرژی به صورت (۵) در نظر گرفته شده است.

$$(...C_p)_{eff} \frac{\partial T}{\partial t} + (...C_p)_f u \cdot \nabla T = \nabla \cdot (K_{eff} \nabla T) + Q$$

که در آن ظرفیت حرارتی و ضریب رسانش حرارتی محیط متخلخل با استفاده از تخلخل ۰/۹۷ محاسبه شده است و در محیطهای غیر متخلخل برابر با خواص سیال در نظر گرفته شده اند. گرمای ویژه در فشار ثابت برای مخلوط گازها به صورت (۶) محاسبه شده است.

$$C_{p} = \tilde{S}_{1}C_{p,1} + \tilde{S}_{2}C_{p,2} + \tilde{S}_{3}C_{p,3} + \dots = \sum_{i}\tilde{S}_{i}C_{p,i}$$
(9)

ضریب رسانش مخلوط از رابطه واسیلجوا^۲ محاسبه شده است[۶]. همچنین ترم Q در معادله (۵) چشمه حرارتی ناشی از واکنش احتراق سوخت است که در لایه کاتالیستی به صورت (۲) محاسبه شده است و در سایر بخشها مقدار آن صفر در نظر گرفته شده است.

$$Q = -r \times \Delta H_{CH_4}$$
(۲)
مقدار ΔH_{CH_4} نشاندهنده آنتالپی احتراق متان است و به صورت (۸) در نظر گرفته می شود [۲].
$$\Delta H_{CH_4} = -806.9 + 1.586e - 2 \times T - 8.485e - 6 \times T^2 - 3.963e - 9 \times T^3 + 2.16e - 12 \times T^4$$
(۸)

۲-۳- معادله بقای گونه

رابطه پیوستگی برای گونه i در مشعل به صورت معادله (۹) و (۱۰) در نظر گرفته شده است. این رابطه با فرض پایا بودن
سیستم و استفاده از مدل نفوذ فیک^۲ برای تخمین فلاکس جرمی در مشعل در نظر گرفته شده است.
(۹)
$$(j_i = -...D_i m \nabla w_i$$

(۱۰)

همچنین به دلیل آن که فیبرهای موجود در مشعل بسیار نازک هستند و نرخ جریان گاز پایین است، این انتظار وجود دارد که اختلاف غلظت و دما در عبور از مرز مشترک سیال-جامد در ساختار متخلخل و فیبری لایه کاتالیستی ناچیز باشد. در نتیجه لایه کاتالیستی را میتوان به صورت یک محیط تکفاز پیوسته در نظر گرفته و جهت تحلیل واکنش سطحی احتراق، به جای استفاده از سینتیک جزئی احتراق متان روی کاتالیست پلاتینیوم بر پایه فیبر آلومینا ، از سینتیک کلی استفاده نمود[۳]. برای این منظور از نتایج مطالعه تجربی تریم و لام استفاده شده و رابطه سینتیک کلی به صورت رابطه (۱۱) در نظر گرفته شد. شایان ذکر است که استفاده از مکانیزم سینتیک کلی نیازمند بهرهمندی از اطلاعات تجربی میباشد در حالی که استفاده از مکانیزم جزئی نیازی به اطلاعات تجربی قبلی ندارد. در شرایط عملکردی مشابه میتوان از مکانیزم سینتیک کلی به منظور پیشبینی پارامترهای عملکردی سیستم با استحصال دقت قابل قبول استفاده نمود[۸].

$$r_{CH 4} = -k \times \exp(\frac{-E}{RT}) \times w_{mol_{CH_4}}^a \times w_{mol_{O_2}}^b$$
(11)

¹ Local thermal equilibrium

² Wassiljewa

³ Fick's law





در این رابطه در دمای بحرانی ۸۱۳ کلوین، ثوابت رابطه عوض میشوند. بنابراین سینتیک کلی زیر را برای احتراق کاتالیستی متان در این مشعل در نظر گرفته شد.

$$T < 813K \implies r_{CH 4} = -k_{LT} \times \exp(\frac{-1.87e5}{RT}) \times w_{mol_{CH_4}} \times w_{mol_{O2}}^{0.75}$$
(17)

$$T > 813K \implies r_{CH 4} = -k_{HT} \times \exp(\frac{-8.61e 4}{R T}) \times w_{mol_{CH_4}} \times w_{mol_{O2}}$$

ضرایب پیشنمایی در مطالعه جدیری و همکاران، به ترتیب <u>kgCH 4</u> 1.67e12 و <u>kgCH 4</u> 7.72e5 کر شده اند، به جای ضرایب مولی از ضرایب جرمی استفاده کرده و دمای بحرانی نیز ۸۱۷ کلوین در نظر گرفته شده بود. این امر باعث ایجاد خطا در نتایج مدلسازی ایشان گردیده است که تصحیحات تمامی این موارد در پژوهش حاضر مد نظر قرار گرفته است [۵].

۳- شرایط مرزی

(17)

در معادله بقای مومنتوم، شرایط مرزی برای نازل ورودی، با توجه به میزان مصرف سوخت مشعل، شرط سرعت ثابت اعمال گردید. همه مرزهای دیگر بدون لغزش فرض شدند، به جز مرز خروجی (سطح کاتالیست) که به صورت فشار ثابت (p=101325(Pa)) در نظر گرفته شده است.

برای شرط مرزی در معادله بقای انرژی، مرزهای ورودی که محل ورود سوخت به سیستم هستند، با دمای محیط همدما قرار داده شده و برای دیواره خروجی، شار حرارتی به صورت (۱۴) در نظر گرفته شد.

$$Nu_{y} = 0.503 \times \left[\frac{Pr}{Pr + 0.986 Pr^{0.5} + 0.492}\right]^{0.25} Ra_{y}^{0.25}$$
(10)

$$Nu_{y} = 0.508 \times Pr^{0.5} \times (0.952 + Pr)^{0.25} Gr_{y}^{0.25}$$
(19)

به منظور انتخاب معادله مناسب برای استفاده به عنوان شرط مرزی جابجایی در مرز خروجی مشعل با توجه به متخلخل بودن سطح مورد نظر، یک محیط متخلخل با ابعاد مشابه مشعل موجود (ارتفاع 0.3m) با سه دمای ثابت 500,800,1100K = T که در محیط با دمای $_{\infty}T(_{\infty}T < T)$ قرار گرفته است، مدل سازی شد. دماهای سطح به گونه ی انتخاب شده است که در محدوده دمای سطح مشعل باشد. هندسه مورد استفاده در تحلیل حاضر در شکل ۲ آورده شده است. همان طور که مشاهده می شود، با توجه به خروج محصولات احتراق از سطح مشعل با سرعت کم، در دو حالت با فرض ورود سیال از سمت چپ محیط متخلخل با سرعت و بدون سرعت ورودی نسبت به محاسبه عدد ناسلت روی سطح محیط متخلخل و مقایسه آن با دو رابطه تجربی فوق اقدام به عمل آمد. منطقه در نظر گرفته شده در مدلسازی به گونهای شرکه ی در در که در نزدیکی سطح، شبکه کوچکتر از سایر مناطق باشد، چرا که گرادیان دما و سرعت بیشتری در این منطقه وجود دارد.



شکل۲- هندسه مدل شده و شبکه بندی ایجاد شده در این مرحله

شکل ۳-الف پروفیل سرعت را در ارتفاع ۰/۲۵ متر، بدون در نظر گرفتن و با در نظر گرفتن سـرعت تحمیلـی ورودی در دمای سطح ۸۰۰ کلوین نشان میدهد. همانطور که مشاهده میگردد، دو پروفیل سرعت بسیار شبیه به هـم هسـتند؛ بنـابراین تحمیل سرعت ورودی با در بخش محیط متخلخل با توجه به دبی کم آن، تاثیر قابل توجهی بـر روی توزیـع سـرعت در جلـوی منطقه مورد بررسی نخواهد داشت. به علت شباهت پروفیلهای سرعت، انتظار میرود که پروفیـلهـای دما نیـز بـا هـم مشـابه باشند؛ این امر در شکل ۳-ب نشان داده شده است. این رفتار در دمای محیط متخلخل برابـر بـا ۵۰۰ و ۱۱۰۰ کلـوین نیـز بـه صورت مشابه تکرار شد.





به منظور استخراج _، Nu_y روی سطح مشعل، شار حرارتی عبوری از سطح، طبق رابطه (۱۷) از مدلسازی به دست آمده و سپس عدد ناسلت از آن استخراج گردید.

$$q_{y} = \frac{K \times Nu_{y}}{y} (T_{s} - T_{\infty})$$
(1Y)



پنجمین کنفرانس سوخت و احتراق ایران



تهران - دانشگاه علم و صنعت ایران - بهمن ماه ۱۳۹۲

مقایسه مقدار عدد _{Nu} به دست آمده از نتایج مدلسازی و روابط (۱۵) و (۱۶) در سه دمای سطح ۵۰۰، ۵۰۰ و ۱۱۰۰ کلوین به دست آورده شد. همان طور که در شکل ۴ نیز مشخص است، در حالت بدون سرعت ورودی رابطه (۱۶) نتایج دقیقتری را به دست میدهد. این در حالی است که با سرعت ورودی رابطه (۱۶) نتایج دقیقتری را به دست میدهد. بنابراین در شبیهسازی مشعل، از رابطه (۱۶) به عنوان بخشی از شرایط مرزی حرارتی برای سطوح عمودی در ادامه این تحقیق استفاده شده است.



شکل ۴- مقایسه عدد ناسلت برای دمای سطح برابر با ۸۰۰ کلوین از مدلسازی و دو رابطه تجربی

برای شرط مرزی در سطوح داغ افقی رو به بالا (بالای مشعل تشعشعی) و رو به پایین (پایین مشعل تشعشعی) نیز به ترتیب از روابط (۱۸) و (۱۹) استفاده شده است.

$$\overline{Nu_L} = 0.15Ra_L^{\frac{1}{3}}$$
(1A)
$$\overline{Nu_L} = 0.27Ra_L^{0.25}$$
(19)

در مرز خروجی q فلاکس حرارتی کل خروجی از سطح مشعل توسط رابطه (۲۰) تخمین زده میشود. ترم اول در سمت راست معادله، مربوط به انتقال حرارت به دلیل انتقال جرم ناشی از خروج محصولات احتراق است. ترم دوم مربوط به انتقال حرارت ناشی از جابجایی طبیعی روی سطج مشعل میباشد که جهت محاسبه آن از رابطه (۱۶) استفاده شده است و ترم سوم مربوط به تشعشع خارج شده از سطح مشعل به محیط اطراف میباشد. مقدار فرض شده برای ضریب صدور سطح برابر با ۰/۶ و دمای سیال در فواصل دور از سطح برابر با ۳۰۰ کلوین در نظر گرفته شده است.

$$q = -...C_{p}u(T - T_{\infty}) - \frac{K \times Nu_{y}}{y}(T_{s} - T_{\infty}) - V_{r}^{\dagger}(T_{s}^{4} - T_{\infty}^{4})$$
(7.)

برای اعمال شرط مرزی در معادله بقای گونهها که برای هر جزء از سیستم (CH₄,O₂,CO₂,H₂O,N₂) نوشته شده است، کسر جرمی اجزا در ورودی سیستم ثابت فرض میشود و متان تنها جزء موجود در ورودی نازل است. شرایط مرزی در خروجی نیز به صورت زیر در نظر گرفته شده است.

$$n.N_i = N_o \tag{(1)}$$

$$N_o = -h_{mass,i} (w_r - w_{\infty}) - \dots u w_{\infty}$$
(TT)

که در آن:









(۳۳)

(۲۴)

 $N_i = -j_i + \dots w_i u$

ترم اول در معادله (۲۲) فلاکس نفوذی و ترم دوم فلاکس جابجایی گونهها را نشان میدهد که در مدلسازیهای انجام شده قبلی در نظر گرفته نشده است. در این رابطه، *h_{mass,i} خریب انتقال جرم گونه i و w_∞ نیز جزء جرمی همان گونه در فاصلهای دور از مرز خروجی است که برای CH₄,H₂O,CO₂ برابر صفر و برای O₂,N₂ به ترتیب برابر ۷/۷۶۷ و ۷/۳۳ می باشد. ضریب انتقال جرم برای گونه <i>i*، توسط رابطه (۲۴) محاسبه شده است.

$$h_{mass,i} = \frac{D_{i,m} \times SH}{N}$$

که در آن $D_{i,m}$ بیانگر ضریب پخش گونه i در مخلوط و y نیز نشان دهنده ارتفاع مشعل میباشد. عدد شروود نیز بر اساس آنالوژی انتقال حرارت و جرم، برابر با عدد ناسلت روی سطح مشعل قرار داده شده است[۱۰].

۴- نتایج

با بکارگیری شرایط مرزی به دست آمده و اعمال آنها در حل معادلات توضیح داده شده، برای اولین بار در ادبیات فن، مدل سه بعدی مشعل تشعشعی کاتالیستی بدون در نظر گرفتن هوای جلوی آن تولید گردید. برای اعتبارسنجی نتایج به دست آمده در شبیه سازی، پروفیل دما حاصل از شبیه سازی، با نتایج تجربی مقایسه شد. شکل ۵ اعتبار سنجی نمودار دما روی سطح مشعل روی خط عمودی در فاصله ۰/۳ متر از لبه سمت راست مشعل را نشان می دهد. همان طور که نشان داده شده است، نتایج مدلسازی سازگاری قابل قبولی با نتایج اندازه گیری شده نشان می دهد به گونه ای که حداکثر میزان خطا در خط عمودی در وسط مشعل برابر با ۱۰٪ به دست آمده است.



شکل ۵- تغییرات دما بر حسب ارتفاع مشعل در فاصله ۰/۳ از سمت راست (وسط طول) مشعل



پنجمین کنفرانس سوخت و احتراق ایران



تهران – دانشگاه علم و صنعت ایران – بهمن ماه ۱۳۹۲

بازده احتراق به دست آمده از مدلسازی که با استفاده از رابطه (۲۵) در مرز خروجی مشعل محاسبه شده است، برابر با ۶۱/۳۰٪ به دست آمد. این در حالی است که مقدار اندازه گیری شده بازده احتراق به صورت تجربی برابر با ۷۶/۷۵ ٪ به دست آمد که خطای برابر با ۲۰ ٪ را به دست میدهد.

 $y = \frac{w_{mol_{CO_2}}}{w_{mol_{CO_2}} + w_{mol_{CH_1}}} = \frac{0.03636}{0.03636 + 0.02295} = 0.6130 = 61.30\%$ (Ya)

شکل ۶- الف، کانتور حجمی کسر جرمی متان را نشان میدهد. همانطور که مشاهده میشود توزیع متان در مشعل غیر یکنواخت است به گونه ای که کسر جرمی متان در وسط مشعل که محل ورود گاز به سیستم است زیاد بوده و با فاصله گرفتن از محل ورود گاز، مقدار آن کاهش می یابد. این غیر یکنواختی در کانتور کسر جرمی اکسیژن در شکل۶- ب نیز دیده می شود به گونه ای که اکسیژن نفوذ کرده به مشعل در قسمت مرکزی که نرخ احتراق بالاتر است، مصرف شده و موجب کاهش کسر جرمی اکسیژن می گردد، این در حالی است که با دور شدن از ناحیه مرکزی مشعل و کاهش نرخ احتراق، اکسیژن کمتری در واکنش مصرف شده و به تدریج کسر جرمی اکسیژن زیاد می شود.



شکل۶- الف-کانتور سهبعدی کسر جرمی متان در مشعل تشعشعی کاتالیستی ب-کانتور سهبعدی کسر جرمی اکسیژن در مشعل تشعشعی کاتالیستی

در شکل ۷ تغییرات کسر جرمی اکسیژن در فاصله ۰/۳ متر از لبه سـمت راسـت مشـعل و در عمـق آن نشـان داده شـده است. همانطور که مشاهده می گردد، اکسیژن در ناحیه مرکزی مشعل سریعتر از سایر نواحی مصرف شده اسـت (در حـالی کـه طبق شکل ۸– الف هنوز متان در وسط مشعل موجود است) که باعث محدود کردن احتراق در این ناحیه شده است، در نتیجـه این امر متان مصرف نشده در اثر لغزش^۱ از سطح خروجی مشعل خارج می گردد.

¹ Slippage



شکل۷- نمودار کسر جرمی اکسیژن در عمق مشعل در سه ارتفاع مختلف در طول ½ مشعل

در شکل ۸- الف تغییرات کسر جرمی متان در فاصله ۰/۳ متر از لبه سمت راست مشعل و در عمق آن را نشان داده شده است. همانطور مشاهده می شود کسر جرمی متان در داخل مشعل، در ارتفاع وسط، بیشینه مقدار خود را داراست و سپس از مقدار آن در بالا و پایین مشعل کاسته می شود. در شکل ۸- ب نرخ احتراق متان بر حسب ارتفاع در فاصله ۰/۳ متر از لبه سمت راست مشعل در عمق آن نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود بیشینه مقدار نرخ احتراق در وسط مشعل رخ می دهد و در پایین و بالای مشعل از مقدار آن کاسته می شود. علت این رفتار وجود متان بیشتر در وسط مشعل و بالا بودن دما به حد کافی برای مصرف تمامی اکسیژن نفوذ کرده در وسط مشعل است. این در حالی است که در بالا و پایین مشعل، با توجه به کاهش دما، نرخ احتراق کم می شود.



شکل۸- الف- نمودار کسر جرمی متان در عمق مشعل در سه ارتفاع مختلف در طول ½ مشعل ب- نمودار نرخ احتراق متان در عمق مشعل در سه ارتفاع مختلف در طول ½ مشعل



پنجمین کنفرانس سوخت و احتراق ایران تهران – دانشگاه علم و صنعت ایران – بهمن ماه ۱۳۹۲



شکل ۹- الف کانتور حجمی دمای مشعل تشعشعی کاتالیستی را به ازای دبی گاز ۴/۹۳ lit/min و ۰شکل ۹- ب نیز منحنی تغییرات دما در سه ارتفاع مختلف از پایین مشعل کاتالیستی در طول 1⁄2 مشعل به صورت عمقی، را نشان میدهد. مشاهده میشود که دما در لایه کاتالیستی که در آن احتراق انجام میشود، افزایش یافته است و مقدار بیشینه خود را در صفحه x=0.3m در داخل لایه کاتالیست در قسمت تحتانی مشعل کسب میکند. همچنین مشاهده می شود که مطابق با نمودارهای نرخ احتراق، محل ایجاد نقطه بیشینه دما، متناظر با نرخ واکنش در وسط مشعل به سطح نزدیک تر میباشد.



شکل۹- الف-کانتور سه بعدی دمای مشعل کاتالیستی در داخل مشعل ب- نمودار دما در عمق مشعل در سه ارتفاع مختلف در طول ½مشعل

۵- نتیجهگیری

در تحقیق حاضر به بررسی عملکرد پنل تشعشعی کاتالیستی جریان متقابل پرداخته شد. با توجه به اشتباهات متعدد در سینتیک و شرایط مرزی استفاده شده در تحقیقات قبلی انجام گرفته در این پنلها، در این تحقیق، نسبت به استفاده از سینتیک واکنش کلی با ضرایب صحیح و شرایط مرزی مناسب برای معادلات حاکم اقدام به عمل آمد. برای این منظور شبیه-سازی عددی سه بعدی از یک پنل تجاری انجام شده و نتایج با مقادیر تجربی تست پنل مقایسه گردید. اعتبارسنجی از دو دیدگاه دما و بازده احتراق موید نتایج قابل قبول از مدل تولید شده بود به گونهای که خطای نمودار دمای سطح پنل در خط عمودی در وسط پنل برابر با ۱۰٪ به دست آمده است. جنبه دیگر اعتبار سنجی نتایج، بازده احتراق به دست آمده از مدلسازی است که خطای برابر با ۲۰٪ را به دست آمده است. جنبه دیگر اعتبار سنجی نتایج، بازده احتراق به دست آمده از مدلسازی پنل، اکسیژن در داخل پنل سریعا در ناحیه مرکزی پنل در احتراق مصرف شده و موجب ایجاد محدودیت در نرخ احتراق و در پنل، اکسیژن در داخل پنل سریعا در ناحیه مرکزی پنل در احتراق مصرف شده و موجب ایجاد محدودیت در نرخ احتراق و در پنل، اکسیژن در داخل پنل سریعا در ناحیه مرکزی پنل در احتراق مصرف شده و موجب ایجاد محدودیت در نرخ احتراق و در پنلی، مشعل و کاهش دما در این نواحی، نرخ احتراق در مناطق مذکور کاهش یافته که این امر منجر به عدم واکنش کامل سوخت و مصرف اکسیژن در این نواحی، نرخ احتراق در مناطق مذکور کاهش یافته که این امر منجر به عدم واکنش کامل



ينجمين كنفرانس سوخت و احتراق ايران تهران – دانشگاه علم و صنعت ایران – بهمن ماه ۱۳۹۲



مراجع

- 1- Pfefferle, L.D., Pfefferle, W.C., Catalysis in Combustion, Catal.Rev0-SCI.ENG, Vol. 29(2&3), pp. 219-267,1987.
- 2- Trimm, D.L., Lam, C.W., *The combustion of methane on platinum-alumina fiber ctalysts-I*, chemical engineering science, Vol. 35, pp. 1405-1413, 1980.
- 3- Trimm, D.L., Lam, C.W., *The combustion of methane on platinum-alumina fiber ctalysts-II*, chemical engineering science, Vol. 35, pp. 1731-1739, 1980.
- 4- Ablow, C.M., Sadamori, H., Analytical model of combustion in a catalytic fiber-mat burner, combustion science and technology, Vol. 5, pp. 1-21, 1987.
- 5- Jodeiri, N., Mmbaga, J.P., Wu, L., Wanke, S.E., Hayes, R.E., modelling a counter-diffusive reactor for methane combustion, Computers and chemical engineering, Vol. 39, pp. 47-56, 2012.
- 6- Poling, B.E., Prausnitz, J.M., O'Connell, J.P., *The properties of gases and liquids*, 5th Edition, McGRAW-HILL, 2001.
- 7- Hayes, R.E., Kolaczkowski, Introduction to catalytic combustion, Gordon and Breach Science, Amsterdam, 1997.
- 8- Shahamiri, S.A., Wierzba, I., "Modeling the reactive processes within a catalytic porous medium", Applied mathematical modeling, Vol. 35, pp. 1915-1925, 2011.
- 9- Nield, D.A., Bejan, A., Convection in Porous Media, 3rd Edition, Springer, New York, 2006.
- 10- Bird, R., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N., Transport Phenomena, 2nd Edition, John Wiley & Sons, 2006.