مجله علمي - پژوهشي مواد پرانرژي

سال هفتم – شماره ۴ – شماره پیاپی ۱۷ – زمستان ۹۱

بررسی انحلال گاز هیدروژن در سوخت هیدرو کربنی با استفاده از روش دینامیک سیالات محاسباتی محمود گرجیا^{*}

تهران- دانشگاه صنعتی مالک اشتر (تاریخ وصول:۹۱/۵/۰۴، تاریخ پذیرش: ۹۱/۹/۱۹)

چکیدہ

در این تحقیق، یک مدل دوبعدی CFD برای بررسی هر دو پدیده هیدرودینامیک و انتقال جرم و تأثیر آنها بر انحلال گاز هیدروژن در یک سوخت هیدروکربنی به کار رفته است. برای این منظور، مدل اولرین-اولرین با به کارگیری روش حجم محدود استفاده شده است. مدل استاندارد ٤-k نیز برای آشفتگی فاز مایع و گاز منظور شده است. سرعت صعود به دست آمده حباب گاز توسط این مدل با داده های آزمایشگاهی مقایسه شد و تطابق خوبی نشان داد. مدل CFD رفتار مورد انتظار از هیدرودینامیک سیستم را به درستی داده برای سرعتهای ظاهری گاز تا ۳ سانتی متر بر ثانیه، مقادیر به دست آمده کسر حجمی گاز در مایع و ضرایب انتقال جرم توسط مدل به ترتیب تا ۱۰/۹۱ و تا ¹¹ گذشت زمان افزایش می یابد تا به مقدار تعادلی خود برسد. زمان لازم برای رسیدن به غلظت تعادلی مایع با سه ضریب انتقال جرم معادل ۲۰۰۰، ۲۰۰۰، و ۲۰۰۰ متر بر ثانیه، به ترتیب حدود ۲۱، ۶۰ و ۲۵ ثانیه بود. بنابراین با انتخاب مناسب هندسه سیستم و معادل ۲۰۰۰، ۲۰۰۰، و ۲۰۰۰ متر بر ثانیه، به ترتیب حدود ۲۱، ۶۰ و ۲۵ ثانیه بود. بنابراین با انتخاب مناسب هندسه سیستم و معادل ۲۰۰۰، ۲۰۰۰، مقدار تا ۲ مانتی، متر بر ثانیه، مقادیر به دست آمده کسر حجمی گاز در مایع و ضرایب انتقال جرم حجمی توسط مدل به ترتیب تا ۲۰۱۱ و تا ۲۰

واژههای کلیدی: انحلال، گاز هیدروژن، هیدرودینامیک، دینامیک سیالات محاسباتی، سـوخت هیـدروکربنی، ســتون حبابی

۱– مقدمه

سوختهای هیدروکربنی مخلوطی از ترکیبهای موجود در برشهای نفتی شامل پارافینها، نفتنها، آروماتیکها و اولفینها و همچنین افزودنیهایی هستند که نوع و میزان آنها متناسب با خواص ویژه مورد انتظار از سوخت، تعیین می شود. چگالی بالا، عدم ایجاد رسوب و خورندگی، دارا بودن بیشترین نسبت هیدروژن به کربن و درنتیجه بیشترین محتوای انرژی، از جمله خواص مطلوب سوخت می باشد. از طرفی برای افزایش نسبت هیدروژن به کربن سوخت روشهای زیر وجود دارد [۱]:

- اضافه کردن درصدی از ترکیبات دارای نسبت پایین کربن به هیدروژن (نظیر آروماتیکها و اولفینها) با ترکیبات پارافینی و ایزوپارافینی.
- استفاده از ترکیبات هیدروژنداری که پیوندهای فیزیکی یا شیمیایی با هیدروژن دارند نظیر هیدریدهای فلزی و هیدریدهای پیچیده.
 - استفاده از هیدریدهای آلی مایع.
- استفاده از ترکیبات آلی فلزی و زئولیتی در توده سوخت که توانایی جذب سطحی مقادیر قابل توجهی هیدروژن را دارا باشند (در کیفیت احتراق و عملکرد سوخت تأثیر منفی نداشته باشند).

^{*} E-mail: gorji_2001@yahoo.com

۱ – استادیار

 استفاده از فن آوری های نو نظیر نانو تیوب های کربنی و نانو بور هیدریدها در سوخت.

از طرفی در دهههای اخیر بررسی امکان حل کردن هیدروژن در مایعات هیدروکربنی خالص و یا مخلوط نیز مورد توجه محققین بوده است که نتایج آن در اکثر موارد قابل استفاده است ولی برای ترکیباتی نظیر قیر (بهعنوان حلال) ناشناخته و مبهم است. حلالیت هیدروژن در ترکیبات هیدروکربنی مایع نه تنها برای افزایش محتوای انرژی سوختهای مایع به کار می رود، بلکه در زمره مهم ترین عوامل مورد نیاز برای طراحی فرآینــدهای مختلـف نفـت و پتروشــیمی و بــهخصـوص فرآینــد هیدروژناسیون کاتالیستی نیز میباشد [۲]. در پالایش نفت نیز هیدروژن به برشهای سنگین نفتی افزوده میشود تا نسبت هیـدروژن به کربن آنها افزایش یابد و کیفیت برشها برای استفاده در فرآیندهایی نظیر هیدروکراکینگ و کاهش ویسکوزیته با هیدروژن، بالا رود. در یالایش نفت همچنین مقادیر زیادی هیدروژن بهمنظور کاهش گوگرد سوخت طی فرآیند سولفور زدایی، نیتروژن زدایی و فلز زدایی استفاده می شود [۳]. انحلال هیدروژن در مایع کمیتی ترمودینامیکی است که علاوه بر شرایط عملیاتی به ترکیب درصد و ماهیت مایع نیز بستگی دارد. اندازه گیریهای آزمایشگاهی نشان داده است که با افزایش تعـداد کربنهای موجود در ترکیب یا مخلوط هیدروکربنی مایع، انحلال یذیری هیدروژن در مایع افزایش می یابد [۳]. حلالیت هیدروژن از مقادیر کم شروع می شود و با افزایش دما و فشار افزایش می ابد [۳و۳]. برای مقوله انحلال، منابع علمی موجود در مورد انحلال گازها در سوختهای مایع و بهخصوص هیدروکربنی بررسی شد. تنها در دو گزارش [۶۹۵] میزان انحلال یذیری گازهای نیتروژن، هلیوم و آرگون در سوختهای هیدرازینی بررسی شده است. چون هدف این مقاله بررسی انحلال گاز هیدروژن در سوخت هیدروکربنی میباشد، مقالات و مراجع مربوطه در زمینه دادههای انحلال پذیری و میزان انحلال این گاز در برشها و ترکیبات مختلف هیدروکربنی بررسی شد. محوریت اکثر دادههای ارائه شده در این مراجع نیز پیشبینی و یا اندازه گیری مقدار حلالیت هیدروژن در هیدروکربنها و یا برشهای نفتی مختلف مورد استفاده در صنایع نفت و پتروشیمی میاشد [۸ و ۳،۷] و در مورد کاربردهای فضایی و یا نظامی مطلبی وجود ندارد. بنابراین با توجه به اهمیت این موضوع، بررسی انحلال هیدروژن در سوختهای هیدروکربنی ضروری بەنظر مىرسد.

از طرفی انحلال گاز هیدروژن در سوخت مایع، تابع هیدرودینامیک سیستم و انتقال جرم بین فاز گاز و مایع میباشد. دینامیک محاسباتی سیالات (CFD) یک ابزار مفید برای بررسی این موضوع میباشد. در

1-Computational Fluid Dynamics

این تحقیق یک مدل دو بعدی CFD در یک راکتور ستون حبابی^۲ برای بررسی هر دو پدیده هیدرودینامیک و انتقال جرم و تأثیر آنها بر انحلال هیدروژن در سوخت به کار رفته است. با توجه به اختلاط کمتر ستون حبابی در مقایسه با تانک همزندار، و درنتیجه انتقال جرم کمتر گاز در مایع، بررسی تأثیر هیدرودینامیک سیستم و توزیع گاز در مایع، و در نتیجه انتقال جرم مربوطه در ستون حبابی درنظر گرفته شده است. همچنین برای کمتر شدن تعداد شبکه مورد نیاز و درنتیجه حجم و زمان محاسبات کمتر، از مدل دوبعدی در ستون حبابی استفاده شده محدود به همراه مدل استاندارد= k برای بیان آشفتگی فاز مایع و گاز به کار رفته است. قابل ذکر است که بیشتر شبیه سازی های ارائه شده در مراجع تنها به هیدرودینامیک سیستم پرداخته اند [۱۰–۹] و به موضوع انتقال جرم و به خصوص مدل سازی انتقال جرم گاز هیدروژن در سوخت مایع پرداخته نشده است. نوآوری این تحقیق، بررسی انتقال جرم گاز هیدروژن و تأثیر آن بر انحلال این گاز در یک سوخت

جرم گاز هیدروژن و تأثیر آن بر انحلال این گاز در یک سوخت هیدروکربنی است. بهعلت تأثیر سرعت فازها و کسر حجمی گاز در مایع بر انتقال جرم، هیدرودینامیک سیستم نیز بررسی میشود. جدول (۱) مشخصات سوخت مایع هیدروکربنی بومی مذکور را نشان میدهد.

جدول ۱ - مشخصات سوخت هیدروکربنی.

درصد حجمی	
•	
١٠	
۵۰	منحنی تفطیر ASIM
٩٠	
۱۰۰	
پارافين	
الفين	درصد حجمی ترکیبات
آروماتيک	
,	دانسیته نسبی در ۲۵°C
	وزن مولکولی
	درصد حجمی ۰ ۹۰ ۹۰ یارافین آروماتیک

۲- توسعه مدل CFD

۲-۱- تئوری رژیم جریان

با افزایش سرعت ظاهری گاز در یک راکتور ستون حبابی که با مایع پر شده است، میزان کسر حجمی گاز در مایع نیـز افـزوده مـیشـود. ایـن افزایش سرعت کسر حجمی تا سرعتی کمتر از سرعت ظـاهری معینـی که سرعت ظـاهری^۳ گـذرا نامیـده مـیشـود، رخ مـیدهـد. در چنـین

www.SID.ir

²⁻Bubble Column

³⁻ Superficial Velocity

۲-۲- مدل پیوستگی و ممنتم

برای هر یک از فازهای گاز و مایع روش اولرین که در آن فاز گاز و مایع بهصورت دو محیط در هم نفوذ کننده درنظر گرفت همیشوند، به کار میرود و روابط بقای جرم و ممنتم برای هر فاز حل میشود. روابط بقای جرم و ممنتم دو فاز پس از متوسط گیری حجمی بهصورت زیر درمیآید [18]:

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla (\alpha_k \rho_k \mathbf{U}_k) \pm \mathbf{F}_{\mathrm{GL}} = 0 \tag{(f)}$$

$$\frac{\partial (\alpha_k \rho_k \mathbf{U}_k)}{\partial \mathbf{t}} + \nabla . (\alpha_k \rho_k \mathbf{U}_k) \pm \mathbf{F}_{GL} = (\Delta)$$
$$-\alpha_k \nabla P + + \nabla . (\alpha_k \rho_k) + \alpha_k \rho_k g + F_{kl}$$

که F_{GL} میزان انتقال جرم بین فازی هیدروژن میباشد که در رابطه U_k ،k میزان انتقال جرم بین فازی هیدروژن میباشد که در رابطه U_k ،k بیان خواهد شد. ρ_k دانسیته فاز α_k ،k کسر حجمی فاز τ_k و k,l و سرعت فاز k,l و k,l و میباشد: تنسور تنش مربوط به فاز k بهصورت زیر میباشد:

$$au_{k} = (\nabla U_{k} + + \nabla U_{k}^{T}) - \frac{2}{3} \mu_{k} \nabla U_{k} I$$
 (۶)
نیروی بین فازی دراگ بهعنوان تنها نیروی تبادل ممنتم بین فازی

درنظر گرفته میشود:

$$F_{\rm kl} = \frac{3}{4} \rho_{\rm L} \alpha_{\rm G} \frac{C_{\rm D}}{d_{\rm b}} |\mathbf{U}_{\rm L} - \mathbf{U}_{\rm G}| (\mathbf{U}_{\rm L} - \mathbf{U}_{\rm G}) \tag{Y}$$

که C_D از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$C_D = \frac{4}{3} \frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_L} g d_b \frac{1}{V_b^2} \tag{A}$$

مدل استاندارد $k - \epsilon$ برای بیان آشفتگی فاز مایع و گاز به کار می و و و رود و روابط انرژی جنبشی آشفته (k) و شدت کاهش انرژی جنبشی آشفته (ϵ) به صورت زیر می باشد:

$$\frac{\partial (\alpha_L \rho_L k)}{\partial t} + \nabla . (\alpha_L \rho_L U_L k) = \nabla . \left(\alpha_L \frac{\mu_L}{\sigma_k} \nabla k \right) + \alpha_L (G - \rho_L \varepsilon)$$
(9)

$$\frac{\partial (\alpha_L \rho_L \varepsilon)}{\partial t} + \nabla . (\alpha_L \rho_L U_L \varepsilon) = \nabla . \left(\alpha_L \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon}} \nabla k \right) + \alpha_L \frac{\varepsilon}{k} (C_2 G - C_2 \rho_L \varepsilon)$$
(1.)

$$G = \mu_L \left(\nabla U_L + \nabla U_L^{\mathrm{T}} \right) : \nabla U_L \tag{11}$$

محدودهای، رژیم عملیاتی ستون حبابی رژیم جریان حبابی ^۱ همگن نامیده میشود و اندازه حبابها در یک محدوده کم و تقریباً یکنواخت که معمولاً ۱ تا ۷ میلیمتر است، قرار می گیرد. با افزایش سرعت ظاهری گاز، بههم پیوستن حبابها اتفاق میافتد که باعث تشکیل حبابهای بزرگ (با سرعت صعود بالاتر) میشود. تشکیل اولین حباب برزگ باعث تغییر رژیم هیدرودینامیکی سیستم میشود. رژیم برزگ باعث تغییر رژیم هیدرودینامیکی سیستم میشود. رژیم جریان ناهمگن^۲ نامیده میشود [۱۳و۱۲]. در رژیم جریان ناهمگن، حبابهای کوچک بههم می پیوندند و حبابهای بزرگتر با اندازه قطر مراب میلیمتر تشکیل میدهند [۱۴]. برای تخمین نقطه گذرای رژیم جریان در راکتور ستون حبابی، رابطه ریلی و همکارانش [۱۳] به کار می رود. مطابق این رابطه میزان کسر حجمی گاز در نقطه گذرای رژیم توسط رابطه زیر بیان میشود:

$$\alpha_{trans} = 0.59(3.85)^{1.5} \sigma^{0.12} \sqrt{\frac{\rho_G^{0.96}}{\rho_L}} \tag{1}$$

میزان سرعت ظاهری گاز در نقطه گذرای رژیم جریان توسط رابطه زیر بیان میشود:

$$U_{trans} = V_{small} \alpha_{trans} (1 - \alpha_{trans}) \tag{(7)}$$

که در آن:

$$V_{small} = \frac{1}{2.84\rho_{\rm G}^{0.04}} \sigma^{0.12} \tag{(7)}$$

طبق این رابطه و درنظر گرفتن کشش سطحی فاز مایع، σ، معادل ۰/۰۷۳ N/m و بهکارگیری خواص فیزیکی ارائه شده در جدول (۲-الف)، سرعت ظاهری گاز در نقطه گذاری رژیم جریان مقدار ۱/۰۳۱ متر بر ثانیه محاسبه می شود [۱۵].

جدول۲ الـف– مقـادیر عـددی خـواص فـاز مـایع و گـاز مـورد اسـتفاده در مدلسازی [1۵].

فاز گاز(هيدروژن)	فاز مايع(سوخت)	خاصيت
۰/٣	•/••••	ضريب نفوذ (m²/sec(D
١/۶	۸۱۲	$_{ m kg/m^3}$ (ho) دانسیته

جدول۲ ب- مقادیر عددی پارامترهای مورد استفاده در مدلسازی [10].

مقدار عددی	پارامتر
•/•••۴	m/sec $\left(k_{L} ight)$ ضريب انتقال جرم هيدروژن
۲.	ثابت تعادل هیدروژن m بدون بعد

1- Bubbly Flow

2- Heterogeneous or Churn-turbulent

$$\mu_t = \rho_L C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{11}$$

که ${
m G}$ شدت تولید آشفتگی و μ_t ویسکوزیته جریان آشفته میباشد. برای حبابهای کوچک، ضریب دراگ از رابطه زیر محاسبه میشود [۱۷]:

$$C_D = \frac{2}{3}\sqrt{Eo} \tag{17}$$

که:

$$\mathrm{Eo} = \frac{g(\rho_L - \rho_G)d_b^2}{\sigma} \tag{14}$$

که در آن، d_b قطر حباب، ho_L دانسیته فاز مایع و ho_G دانسیته فاز گاز میباشد. برای صعود یک حباب در مایع ساکن، سرعت صعود میتوانـد از رابطه ضریب دراگ بهدست آید:

$$V_b = \sqrt{\frac{(\rho_L - \rho_G)g}{\binom{3}{4}\binom{C_D}{d_b}\rho_L}} \tag{10}$$

۲-۳- مدل انتقال جرم

برای بیان پدیده انتقال جرم بین دو فاز، رابطه انتقال عمومی زیر بـرای غلظت هیدروژن در فاز مایع و گاز درنظر گرفته می شود:

$$\frac{\partial(\alpha_k\rho_k C_k)}{\partial t} + \nabla (\alpha_k\rho_k C_k) = \nabla (\alpha_k\rho_k D_k \nabla C_k) \pm \rho_k F_{GL} \quad (19)$$

 F_{GL} و D_k بهترتیب غلظت و ضریب نفوذ هیدروژن در فاز k و D_k میزان انتقال جرم هیدروژن بین فاز گاز و مایع در فصل مشتر ک فازها بهصورت زیر می باشد:

$$F_{GL} = K_L a (C_L^* - C_L) \tag{1V}$$

که K_L ضریب انتقال جرم کلی هیدروژن میباشد. عموماً ضریب انتقـال جرم کلی بهصورت زیر بیان میشود:

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{mk_G} - \frac{1}{k_L} \tag{1A}$$

معمولاً و بهویژه در این حالت خاص که انتقال جرم هیدروژن از فاز گاز به مایع صورت میگیرد، مقاومت فاز مایع کنتـرل کننـده انتقـال جـرم میباشد، یعنی: $k_L \ll k_G m$ و درنتیجه: $K_L = k_L = k_L$ سطح مشـترک

$$a = \frac{6 \, \alpha_L}{d_P} \tag{19}$$

و C_L^* غلظت تعادلی هیدروژن در فاز مایع بهصورت زیر میباشد:

$$C_L^* = H P_G = m C_G \tag{(Y \cdot)}$$

که H ثابت هنری برای هیدروژن و P_G فشار جزئی هیـدروژن در فـاز گاز و m ثابت تعادل هیدروژن میباشد.

۲-۴-ایجاد مش و شرایط مرزی

ستون حبابی با قطر //۰ و ارتفاع //۱ متر توسط شبکه دوبعدی و با ۲۵۰ مش (۲۵۰×۲۵ :x x: ۲۵) شبیهسازی شد. برای بررسی اثـر تعـداد مش بر محاسبات، نتایج کسر حجمی گاز در مایع در سـرعت ظـاهری گاز معادل ۲ سانتیمتر بر ثانیه برای شبکههای با تعداد متفاوت مش در شکل (۱) آمده است. مطابق این شکل، کسر حجمی گاز در مایع با تعداد بیش از ۶۲۵۰ مش، مستقل از تعداد مش است. از طرفی تعـداد مش بیشتر نه تنها تأثیری در نتایج محاسبات هیدرودینامیک و انتقـال جرم ندارد، بلکه زمان و حجم محاسبات را نیز افزایش می دهد. اندازه قطر حبابها ثابت و برابر ۴ میلیمتر درنظر گرفته شـده است.

ایماره عطر حبابات دبا و برابر ۲ مینی سر دارطر کریت سناه است. همچنین از شکستن و باهم پیوستن حبابها صرف نظر شده است. در این تحقیق، کف راکتور که هیدروژن خالص از آنجا توزیع می شود، بهعنوان شرط مرزی سرعت ورودی درنظر گرفته شده است. بالای راکتور بهعنوان شرط مرزی فشار خروجی فرض شد. شرط مرزی بدون لغزش نیز در دیواره راکتور درنظر گرفته شد و شار انتقال جرم در این دیواره برابر صفر فرض شد.

۲-۵- روش حل

برای حل مدل CFD در این مقاله، نرم افزار Eluent 6.2.3 به کار گرفته شد. برای حل جملات همرفتی در روابط ممنتم از روش هیبرید^۱ استفاده شده است. روش جفت کردن روابط سرعت – فشار نیز روش SIMPLE^۲ میباشد. شبیهسازی برای سرعت ظاهری گاز ورودی کمتر از ۳/۱ سانتیمتر بر ثانیه انجام شد. برای هر شبیهسازی ابتدا هیدرودینامیک سیستم به صورت دینامیک با گام زمانی ۲۰۰۰۲ ثانیه حل شد تا شرایط پایا که در آن تمام متغیرها ثابت میمانند، به دست آید. سپس نتایج حالت پایای هیدرودینامیک برای شروع محاسبات انتقال جرم به کار رفت که در آن روابط هیدرودینامیکی حل نمی شد.

¹⁻ Hybrid

²⁻SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations)



شکل۱- نمودار استقلال نتایج کسر حجمی گاز در مایع از تعداد سلول.

بهعبارتی در حین انجام محاسبات انتقال جرم، هیدرودینامیک حالت پایا درنظر گرفته شد. جدول (۲) مقادیر عددی خواص و پارامترهای به-کار رفته در مدلسازی را نشان میدهد [۱۵].

۳- نتایج و بحث

بهعلت موجود نبودن دادههای آزمایشگاهی و گران قیمت بودن و عدم دسترسی به تجهیزات آزمایشگاهی برای اندازه گیری ضریب انتقال جرم و کسر حجمی گاز هیدروژن در مایع هیدروکربنی موجود، برای حصول اطمینان از صحت مدل، ابتدا سرعت صعود حباب با دادههای آزمایشگاهی موجود برای صعود حباب هوا در مایع آب مقایسه شد. سپس ضریب انتقال جرم و کسر حجمی محاسبه شده توسط مدل موجود، با روابط تئوری مقایسه شد. اطمینان از صحت مقدار سرعت صعود حباب تا حد بسیار زیادی محاسبات هیدرودینامیک و انتقال جرم مطمئنی را بههمراه دارد، زیرا سرعت فاز مایع می باشد.

حباب صعود کننده، مطابق رابط ۵ (۱۵) روی ضریب دراگ تأثیر گذار است و بهعلت تأثیر ضریب دراگ روی نیروی بین فازی (تبادل ممنتم بین فازی) مطابق روابط قسمت (۲-۲)، تعیین کننده سرعت فاز مایع میباشد. سرعت فاز مایع نیز مطابق رابط ۵ (۱۶) قسمت (۲-۳)، بر انتقال جرم بین فازی تأثیر گذار است.

برای این منظور، سرعت صعود حباب هوا در مایع آب توسط روابط (۱۳) تا (۱۵) محاسبه و با دادههای آزمایشگاهی موجود [۱۸] مقایسه شد. مقدار محاسبه شده برای سرعت صعود حباب هوا ۱/۲۳ متر بر ثانیه بود که در شکل (۲) با دادههای آزمایشگاهی مقایسه شده است. مطابق شکل، تطابق خیلی خوبی بین سرعتهای صعود محاسبه شده و آزمایشگاهی وجود دارد و سرعت صعود حبابهای با قطر ۳ تا ۸ میلیمتر مستقل از قطر حباب است. در این تحقیق نیز قطر حباب معادل ۴ میلیمتر درنظر گرفته شده است.





شکل۲ – مقایسه سرعت صعود یک حباب هوا در مایع آب برحسب قطر حباب با دادههای آزمایشگاهی [۱۸].

۳-۱-کسر حجمی گاز در مایع

ابتدا با حل دینامیکی روابط هیدرودینامیک و بهدست آوردن نتایج حالت پایای هیدرودینامیک، کسر حجمی گاز در مایع در مقادیر مختلف سرعت ظاهری گاز بهدست میآید. سپس برای صحه گذاری مقادیر کسر حجمی بهدست آمده توسط مدل، این مقادیر با مقادیر بهدست آمده توسط رابطه تئوری محاسبه کسر حجمی گاز در مایع مقایسه میشوند. برای محاسبه کسر حجمی گاز در مایع، از رابطه جوشی استفاده شده است [۱۹]:

$$\alpha = \frac{U}{0.3 + U} \tag{(1)}$$

که در این رابطه، U سرعت ظاهری گاز برحسب متر بر ثانیه و α کسر حجمی گاز در مایع میباشد. شکل (۳) نتایج حالت پایای کسر حجمی گاز محاسبه شده توسط مدل و مقایسه این نتایج با رابطه (۲۱) را در مقادیر مختلف سرعت ظاهری گاز ورودی را نشان میدهد. مطابق این شکل، با افزایش سرعت ظاهری گاز، کسر حجمی گاز در مایع افزایش مییابد و برای سرعتهای ظاهری گاز تا ۳ سانتیمتر بر ثانیه، مقادیر بهدست آمده کسر حجمی گاز در مایع توسط مدل تا مقدار مقادیر باشد. مقایسه دادههای محاسبه شده توسط مدل، تطابق خوبی با کسر حجمی محاسبه شده توسط (۲۴) دارد.

حوبی با نشر حبقی محاسبه سنه توسط رابطه (۲۰) دارد. مقادیر عددی کسر حجمی گاز در مایع رسم شده در شکل (۳)، مقادیر متوسط گیری شده در کل سطح محاسباتی مدل میباشد. بهعبارتی متوسط سطحی پارامتر کسر حجمی گاز در مایع بهصورت زیر بهدست میآید:

$$\alpha = \frac{\int \alpha \, dA}{\int dA} \tag{(TT)}$$

برای درک بهتر موضوع، نمودار توزیع شعاعی سـرعت محـوری مـایع و کسر حجمی گاز در مایع برای سرعت ظاهری گاز معادل ۲ سـانتیمتـر Archive of SID

بر ثانیه مربوط به شکل (۳) در شکل (۴) رسم شده است. مقدار متوسط گیری شده داده های کسر حجمی گاز در مایع شکل (۴– ب) در سرعت ظاهری گاز معادل ۲ سانتیمتر بر ثانیه، توسط رابطه (۲۲) معادل ۲۰۶۳ میباشد که این مقادیر در شکل (۳) قابل مشاهده است. مطابق شکل (۴– الف)، در مرکز ستون حبابی، حداکثر سرعت معادل ۲۲/۰ متر بر ثانیه میباشد. بههمین دلیل مطابق شکل (۴– ب) بیشترین مقدار کسر حجمی مایع نیز در مرکز ستون میباشد که باعث حداکثر ضریب انتقال جرم حجمی و درنتیجه حداکثر انتقال جرم در مرکز ستون میشود. همچنین میزان کسر حجمی و سرعت محوری مایع، با حرکت در جهت شعاعی کاهش میباید که منجر به کاهش ضریب انتقال جرم حجمی در جهت شعاعی میشود.



۲-۳- ضریب انتقال جرم حجمی گاز در مایع

پس از بهدست آمدن نتایج حالت پایای هیدرودینامیک، با استفاده از نتایج حالت پایای میزان کسر حجمی گاز در مایع، ضریب انتقال جرم حجمی گاز در مایع در مقادیر مختلف سرعت ظاهری گاز توسط مدل بهدست میآید. سپس برای صحه گذاری مقادیر ضریب انتقال جرم حجمی بهدست آمده توسط مدل، این مقادیر با مقادیر بهدست آمده توسط روابط تئوری محاسبه ضریب انتقال جرم حجمی گاز در مایع مقایسه میشوند. برای محاسبه ضریب انتقال جرم حجمی از روابط مقایسه میشوند. برای محاسبه ضریب از ۲۰] و میرون [۲۱] پیشنهاد شده اند، استفاده شد:

$$k_{\rm L}a = D_{\rm C}^{0.17} U^{0.7} \tag{(77)}$$

$$k_{\rm L}a = \frac{0.874}{\mu - 0.979}$$
(74)

که D_c قطر ستون برحسب متر، U سرعت ظاهری گاز برحسب متر بر ثانیه و $k_L a$ ضریب انتقال جرم حجمی برحسب s^{-1} میباشد. شکل (۵) نتایج ضریب انتقال جرم حجمی محاسبه شده توسط مـدل و مقایسـه

این نتایج با روابط (۲۳) و (۲۴) ضریب انتقال جرم حجمی در مقادیر مختلف سرعت ظاهری گاز ورودی را نشان میدهد. مطابق این شکل با افزایش سرعت ظاهری گاز، ضریب انتقال جرم حجمی افزایش مییابد و برای سرعتهای ظاهری گاز تا ۳ سانتیمتر بر ثانیه، مقادیر بهدست آمده ضرایب انتقال جرم حجمی توسط مدل تا مقدار ¹⁻8 ۲۰/۰۵۴ می-باشد. در اینجا نیز مقایسه داده های محاسبه شده توسط مدل تطابق خوبی ، با کسر حجمی محاسبه شده توسط روابط تئوری دارد. از طرفی همان طور که مشاهده می شود، شیوه تغییرات ضریب انتقال جرم میکند و شیوه تغییرات مشابهی را نشان میدهد. مقادیر عددی ضرایب انتقال جرم حجمی گاز در مایع رسم شده در شکل (۵) نیز مقادیر متوسط گیری شده در کل سطح محاسباتی مدل مطابق رابطه (۲۲)

برای درک بهتر موضوع، نمودار توزیع شعاعی ضریب انتقال جرم حجمی گاز در مایع برای سرعت ظاهری گاز معادل ۲ سانتیمتر بر ثانیه مربوط به شکل (۶) رسم شده است. مقادیر متوسط گیری شده داده های ضریب انتقال جرم حجمی شکل (۶) در سرعت ظاهری گاز معادل ۲ سانتیمتر بر ثانیه، توسط رابطه (۲۲) معادل ^{۱-}S S⁻¹ میاشد که این مقدار در که در شکل (۶) قابل مشاهده است.

۳-۳- غلظت هیدروژن در فاز مایع

پس از بهدست آمدن نتایج کسر حجمی و ضریب انتقال جـرم حجمـی گاز در مایع، روابط انتقال جرم مدل حل شد و غلظت گاز هیدروژن در سوخت مایع هیدروکربنی مذکور برحسب زمان بهدست آمد که در شکل (۷) نمایش داده شده است. مطابق شکل با ضریب انتقال جرم معادل ۲۰۰۰۴ متر بر ثانیه ، زمان ۱۲۰ ثانیه نیاز است تا غلظت هیدروژن در فاز مایع به غلظت تعادلی خـود برسـد. از طرفـی هـر چـه میزان ضریب انتقال جرم گاز در مایع بزرگتر باشد، زمان لازم برای رسیدن به حالت تعادلی کمتر است. برای درک بهتر موضوع، محاسبات انتقال جرم با ضرایب انتقال جرم ۰٬۰۰۸ و ۰٬۰۰۲ نیز انجام و نتایج این ضریب بر غلظت هیدروژن در فاز مایع با یک دیگر مقایسه شد. مقادیر انتخاب شده بر اساس شدت اختلاط دو فاز از مرجع [۲۲] انتخاب شد. این مقایسه در شکل (۸) انجام شده است. مطابق این شکل، برای ضرایب انتقال جرم معادل ۰/۰۰۰۴، ۰/۰۰۰۸ و ۰/۰۰۲ متر بر ثانیه، زمان لازم برای رسیدن غلظت هیدروژن به حالت تعادل در فاز مایع، بهترتیب معادل ۱۲۰، ۶۰ و ۲۵ ثانیه می باشد. به عبارتی هر چه میزان ضریب انتقال جرم گاز هیدروژن در فاز مایع بزرگتر باشد، زمان لازم برای رسیدن به غلظت هیدروژن در فاز مایع به حالت تعادلی کمتر است. این اختلاف زمان ها، به علت اختلاف در ضریب انتقال جرم حجمی گاز در مایع میباشد که ضریب انتقال جـرم حجمـی نیـز خـود

تابعی از ضریب انتقال جرم میباشد. برای درک بهتر موضوع، شکل (۹) تاثیر ضریب انتقال جرم بر ضریب انتقال جرم حجمی را نشان میدهد. مطابق شکل، با افزایش ضریب انتقال جرم گاز در مایع، ضریب انتقال جرم حجمی گاز در مایع نیز افزایش مییابد. از طرفی ضریب انتقال جرم سیستم میتواند تابعی از میزان اختلاط باشد و با افزایش کسر حجمی و ضریب انتقال جرم گاز در مایع، میزان انتقال جرم گاز در مایع افزایش مییابد. به عبارتی کسر حجمی و میزان انحلال گاز در مایع، تابع شرایط عملیاتی و هیدرودینامیک هندسه سیستم (چگونگی و سرعت تماس و اختلاط فازها) میباشد. بنابراین با انتخاب مناسب

سیستم و داشتن توزیع و تماس مناسب فازها و همچنین انتقال جرم و انحلال گاز هیدروژن در سوخت مایع هیدروکربنی با بالاترین حد اختلاط و درنتیجه بالاترین مقدار ضریب انتقال جرم گاز- مایع، بهترین عملکرد انحلال هیدروژن در سوخت هیدروکربنی بهدست خواهد آمد. درنهایت میتوان گفت که با انتخاب هندسه و شرایط عملیاتی مناسب سیستم، میتوان مقادیر مناسب سرعت و توزیع گاز، ضریب انتقال جرم و درنتیجه شرایط مطلوب توزیع گاز در مایع و زمان رسیدن غلظت گاز به غلظت تعادلی در فاز مایع را تأمین کرد.



شکل ۴– نمودار توزیع شعاعی سرعت محوری مایع و کسر حجمی گاز در مایع (سرعت ظاهری گاز معادل ۲ سانتیمتر بر ثانیه) الف) سرعت محوری مایع، ب) کسر حجمی مایع.



شكل ۵-نمودار تغييرات ضريب انتقال جرم حجمي با سرعت ظاهري گاز ورودي. الف) رابطه (۲۴)، ب) رابطه (۲۳).



شکل ۶- نمودار توزیع شعاعی ضریب انتقال جرم حجمی (سرعت ظاهری گاز معادل ۲ سانتیمتر بر ثانیه).



شکل ۷- تغییرات غلظت هیدروژن در فاز مایع با زمان تا لحظه رسیدن به غلظت تعادلی (سرعت ظاهری گاز معادل ۲ سانتیمتر بر ثانیه).



شکل ۸- مقایسه تغییرات غلظت هیدروژن در فاز مایع با زمان تا رسیدن به غلظت تعادلی با ضرایب انتقال جرم ۰/۰۰۰۴، ۰/۰۰۰۸ و ۰/۰۰۲ متر بر ثانیه (سرعت ظاهری گاز معادل ۲سانتیمتر بر ثانیه).



شکل ۹- مقایسه تغییرات ضریب انتقال جرم حجمی با سرعت ظاهری گاز برای ضریب انتقال جرم ۰/۰۰۰۴، ۰/۰۰۰۴ و ۰/۰۰۲ متر بر ثانیه.

۴- نتیجه گیری

برای بررسی انحلال هیدروژن در یک سوخت مایع هیدروکربنی بومی، یک مدل دو بعدیCFD در راکتور سـتون حبابی بـهکار رفتـه است. راکتور با قطر و ارتفاع ۰/۱ و ۱/۰ متر با هیـدروکربن پـر شـده است و هیدروژن با سرعت ورودی کمتر از ۳/۱ سانتیمتـر بـر ثانیـه داخـل آن توزیع میشود. بـرای هـر شـبیهسازی ابتـدا هیـدرودینامیک سیستم بـهصـورت دینامیـک حـل مـیشـود و سـپس نتـایج حالـت پایـای هیدرودینامیک برای حل مدل انتقال جرم استفاده میشود.

برای اطمینان از صحت مدل به کار رفته، ابتـدا سـرعت محاسـبه شـده برای صعود حباب گاز با دادههای آزمایشـگاهی مقایسـه شـد کـه ایـن مقایسه تطابق خوبی نشان داد. همچنین ضـریب انتقـال جـرم و کسـر حجمی محاسبه شده توسط مدل موجود نیز با روابـط تئـوری مقایسـه شد که این مقایسه هم تطابق خوبی نشان داد. از طرفی نتایج بـهدست آمده توسط مدل نشان داد که با افـزایش سـرعت ظـاهری گـاز، کسـر حجمی گاز در مایع و ضریب انتقال جـرم افـزایش مـیابـد. همچنـین نتایج نشان داد که غلظت هیدروژن در سوخت مـایع بـا گذشـت زمـان افزایش می ابد تا به مقدار تعـادلی خـود در مـایع برسـد و بـا افـزایش می ابد. بنابراین با انتخاب هندسه و شرایط عملیاتی مناسـب سیسـتم، می توان مقادیر مناسب سرعت گـاز و ضـریب انتقـال جـرم و درنتیجـه شرایط مطلوب توزیع گاز در مایع، و زمان رسـیدن بـه غلظـت تعـادلی هیدروژن در مایع را تأمین کرد.

مراجع

- "A Multiyear Plan for the Hydrogen R&D Program. Rationale, Structure, and Technology Roadmaps, Office of Power Delivery, Office of Power Technologies, Energy Efficiency and Renewable Energy,"; U.S. Department of Energy, 1999.
- [2] Cai, H. Y.; Shaw, J. M.; Chung, K. H. "Hydrogen Solubility Measurements in Heavy Oil and Bitumen Cuts"; Fuel 2001, 80, 1055.

- [12] Deckwer, W .D. "Bubble Column Reactors"; Wiley, New York, 1992.
- [13] Krishna, R.; Ellenberger, J.; Maretto, C. "Flow Regimes Transition in Bubble Columns"; Int. Comm. Heat Mass Transfer 1999, 26, 467-575.
- [14] De Swart, J. W. A.; Van Vliet, R. E.; Krishna, R. "Size, Structure and Dynamics of Large Bubbles in a 2-D Slurry Bubble Column"; Chemical Eng. Sci. 1996, 51, 4619-4629.
- [15] Poling, B. E.; Prausnitz, J. M.; O'conel, J. P. "The Properties of Gases and Liquids"; Mcgraw-Hill, 2001
- [16] Ranade, V. V. "Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering"; Academic Press, New York, 2002.
- [17] Clift, R.; Grace, J. R.; Weber, M. E. "Bubbles, Drops and Particles"; Academic Press, San Diego, 1978.
- [18] Krishna, R.; Urseanu, M. I.; Van Baten, J. M.; Ellenberger, J. "Wall Effects on the Rise of Single Gas Bubbles in Liquids"; Int. Commun. Heat Mass Transfer 1999, 26, 781–790.
- [19] Joshi, J. B.; Sharma, M. M. "A Circulation Model for Bubble Columns"; Trans. of the Inst. of Chemical Eng. 1979, 57, 244-251.
- [20] Akita, K.; Yoshida, F. "Gas Holdup and Volumetric Mass Transfer Coefficient in Bubble Columns"; Industrial and Eng. Chemisty Process Design and Development 1973, 12, 76-80.
- [21] Miron, A.; Garcia-Camacho, F.; Contreras-Gomez, A.; Molina-Grima, E.; Chisti, Y. "Bubble Column and Airlift Photobioreactors for Algal Culture."; Aiche J. 2000, 46, 1872–1887.
- [22] Tatterson, G. B. "Fluid Mixing and Gas Dispersion in Agitated Tanks"; Mcgraw-Hill, New York, 1991.

- [3] Riazi, M. R.; Roomi, Y. A. "A Method to Predict Solubility of Hydrogen in Hydrocarbons and Their Mixtures"; Chem. Eng. 2007, 62, 6649.
- [4] Cai, H. Y.; Shaw, J. M .; Chung K. H. "The Impact of Solid Additives on the Apparent Solubility of Hydrogen in Petroleum Fractions and Model Hydrocarbon Liquids"; Fuel 2001, 80, 1065.
- [5] Chang, E. T.; Gokcen, N.; Poston, T. M. "Thermodynamic Properties of Gases in Propellants Solubility of He, N2, and Ar in Hydrazine, Methylhydrazine, and Unsymmetrical Dimethylhydrazine"; Space and Missile Sys. Organization, Los Angeles Air Force Station, Los Angeles, California. October 1967.
- [6] Schmidt, E. W. "Hydrazine and its Derivatives (Preparation, Properties, Applications)"; Wiley, Vol. 1, 2001.
- [7] Fonseca, I. M. A.; Almeida, J. P. B.; Fachada, H. C. "Automated Apparatus for Gas Solubility Measurements"; J. Chem. Thermodynamics 2007, 39, 1407-1411.
- [8] Yuan, H.; Gosling, C.; Kokayeff, P.; Murad, S. "Prediction of Hydrogen Solubility in Heavy Hydrocarbons Over a Range of Temperatures and Pressures Using Molecular Dynamics Simulations"; Fluid Phase Equilibria 2010, 299, 94-101.
- [9] Van Baten, J. M.; Ellenmberge J.; Krishn R. "Scale-Up Strategy for Bubble Column Slurry Reactors Using CFD Simulations"; Catalysis Today 2003, 79-80, 259-265.
- [10] Krishna, R.; Van Baten, J. M.; Urseanu, M. I.; Ellenberger, J. "Design and Scale Up of a Bubble Column Slurry Reactor for Fischer-Tropsch Synthesis"; Chemical Eng. Sci. 2001, 56, 537-545.
- [11] Krishna, R.; Van Baten, J. M.; Urseanu, M. I. "Three-Phase Eulerian Simulations of Bubble Column Reactors Operating in the Churn-Turbulent Flow Regime: A Scale-Up Strategy"; Chemical Eng. Sci. 2000, 55, 3275-3286.