

بررسی انحلال گاز هیدروژن در سوخت هیدروکربنی با استفاده از روش دینامیک سیالات محاسباتی

محمود گرجی*

تهران - دانشگاه صنعتی مالک اشتر

(تاریخ وصول: ۹۱/۵/۰۴، تاریخ پذیرش: ۹۱/۰۹/۱۱)

چکیده

در این تحقیق، یک مدل دو بعدی 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 $k-\epsilon$ نیز برای آشفتگی فاز مایع و گاز منظور شده است. سرعت صعود به دست آمده حباب گاز توسط این مدل با داده‌های آزمایشگاهی مقایسه شد و تطابق خوبی نشان داد. مدل CFD رفتار مورد انتظار از هیدرودینامیک سیستم را به درستی نشان داد. برای سرعت‌های ظاهری گاز تا ۳ سانتی‌متر بر ثانیه، مقادیر به دست آمده کسر حجمی گاز در مایع و ضرایب انتقال جرم حجمی توسط مدل به ترتیب تا ۰/۰۹۱ و تا $0/054 s^{-1}$ بود. نتایج محاسبات انتقال جرم نشان می‌دهد که غلظت هیدروژن در سوخت مایع با گذشت زمان افزایش می‌یابد تا به مقدار تعادلی خود برسد. زمان لازم برای رسیدن به غلظت تعادلی مایع با سه ضریب انتقال جرم معادل ۰/۰۰۰۴، ۰/۰۰۰۸ و ۰/۰۰۲ متر بر ثانیه، به ترتیب حدود ۱۲۰، ۶۰ و ۲۵ ثانیه بود. بنابراین با انتخاب مناسب هندسه سیستم و سرعت گاز، می‌توان مقادیر مناسب انتقال جرم و توزیع گاز در مایع را برای انحلال گاز هیدروژن در سوخت مایع داشت.

واژه‌های کلیدی: انحلال، گاز هیدروژن، هیدرودینامیک، دینامیک سیالات محاسباتی، سوخت هیدروکربنی، ستون حبابی

۱- مقدمه

- 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 ژئولیتی در توده سوخت که توانایی جذب سطحی مقادیر قابل توجهی هیدروژن را دارا باشند (در کیفیت احتراق و عملکرد سوخت تأثیر منفی نداشته باشند).

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 می‌شود. چگالی بالا، عدم ایجاد رسوب و خوردگی، دارا بودن بیشترین نسبت هیدروژن به کربن و در نتیجه بیشترین محتوای انرژی، از جمله خواص مطلوب سوخت می‌باشد. از طرفی برای افزایش نسبت هیدروژن به کربن سوخت روش‌های زیر وجود دارد [۱]:

* E-mail: gorji_2001@yahoo.com

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 همزن دار، و در نتیجه انتقال جرم کمتر گاز در مایع، بررسی تأثیر هیدرودینامیک سیستم و توزیع گاز در مایع، و در نتیجه انتقال جرم مربوطه در ستون حبابی در نظر گرفته شده است. همچنین برای کمتر شدن تعداد شبکه مورد نیاز و در نتیجه حجم و زمان محاسبات کمتر، از مدل دوبعدی در ستون حبابی استفاده شده است. برای این منظور، مدل اولرین-اولرین با به کارگیری روش حجم محدود به همراه مدل استاندارد $k - \epsilon$ 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 [۹-۱۱] 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 هیدروکربنی است. به علت تأثیر سرعت فازها و کسر حجمی گاز در مایع بر انتقال جرم، هیدرودینامیک سیستم نیز بررسی می شود. جدول (۱) مشخصات سوخت مایع هیدروکربنی بومی مذکور را نشان می دهد.

جدول ۱- مشخصات سوخت هیدروکربنی.

نقطه جوش (°C)	درصد حجمی	منحنی تقطیر ASTM
۷۶/۳	۰	
۹۷/۶	۱۰	
۱۳۷/۲	۵۰	
۱۸۰/۸	۹۰	
۲۰۱/۲	۱۰۰	درصد حجمی ترکیبات
۱۵	پارافین	
۴۰	الفین	
۴۵	آروماتیک	دانسیته نسبی در ۲۵°C
۰/۸۱۲		
۱۰۷		وزن مولکولی

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 نیز افزوده می شود. این افزایش سرعت کسر حجمی تا سرعتی کمتر از سرعت ظاهری معینی که سرعت ظاهری^۳ گذرا نامیده می شود، رخ می دهد. در چنین

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

از طرفی در دهه های 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 (به عنوان حلال) ناشناخته و مبهم است. حلالیت هیدروژن در ترکیبات هیدروکربنی مایع نه تنها برای افزایش محتوای انرژی سوخت های مایع به کار می رود، بلکه در زمره مهم ترین عوامل مورد نیاز برای طراحی فرآیندهای مختلف نفت و پتروشیمی و به خصوص فرآیند هیدروژناسیون کاتالیستی نیز می باشد [۲]. در پالایش نفت نیز هیدروژن به برش های سنگین نفتی افزوده می شود تا نسبت هیدروژن به کربن آنها افزایش یابد و کیفیت برش ها برای استفاده در فرآیندهای نظیر هیدروکراکینگ و کاهش ویسکوزیته با هیدروژن، بالا رود. در پالایش نفت همچنین مقادیر زیادی هیدروژن به منظور 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 گیری های آزمایشگاهی نشان داده است که با افزایش تعداد کربن های موجود در ترکیب یا مخلوط هیدروکربنی مایع، انحلال پذیری هیدروژن در مایع افزایش می یابد [۳]. حلالیت هیدروژن از مقادیر کم شروع می شود و با افزایش دما و فشار افزایش می یابد [۴ و ۳]. برای مقوله انحلال، منابع علمی موجود در مورد انحلال گازها در سوخت های مایع و به خصوص هیدروکربنی بررسی شد. تنها در دو گزارش [۵ و ۶] میزان انحلال پذیری گازهای نیتروژن، هلیوم و آرگون در سوخت های هیدرازینی بررسی شده است. چون هدف این مقاله بررسی انحلال گاز هیدروژن در سوخت هیدروکربنی می باشد، مقالات و مراجع مربوطه در زمینه داده های انحلال پذیری و میزان انحلال این گاز در برش ها و ترکیبات مختلف هیدروکربنی بررسی شد. محوریت اکثر داده های ارائه شده در این مراجع نیز پیش بینی و یا اندازه گیری مقدار حلالیت هیدروژن در هیدروکربن ها و یا برش های نفتی مختلف مورد استفاده در صنایع نفت و پتروشیمی می باشد [۷ و ۸، ۳] و در مورد کاربردهای فضایی و یا نظامی مطلبی وجود ندارد. بنابراین با توجه به اهمیت این موضوع، بررسی انحلال هیدروژن در سوخت های هیدروکربنی ضروری به نظر می رسد.

از طرفی انحلال گاز هیدروژن در سوخت مایع، تابع هیدرودینامیک سیستم و انتقال جرم بین فاز گاز و مایع می باشد. دینامیک محاسباتی سیالات^۱ (CFD) یک ابزار مفید برای بررسی این موضوع می باشد. در

2-Bubble Column
3- Superficial Velocity

1-Computational Fluid Dynamics

۲-۲- مدل پیوستگی و ممنتم

برای هر یک از فازهای گاز و مایع روش اولرین که در آن فاز گاز و مایع به صورت دو محیط در هم نفوذ کننده در نظر گرفته می شوند، به کار می رود و روابط بقای جرم و ممنتم برای هر فاز حل می شود. روابط بقای جرم و ممنتم دو فاز پس از متوسط گیری حجمی به صورت زیر درمی آید [۱۶]:

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k U_k) \pm F_{GL} = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k U_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k U_k) \pm F_{GL} = -\alpha_k \nabla P + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k) + \alpha_k \rho_k g + F_{kl} \quad (5)$$

که F_{GL} میزان انتقال جرم بین فازهای هیدروژن می باشد که در رابطه (۱۷) بیان خواهد شد. ρ_k دانسیته فاز k ، α_k کسر حجمی فاز k ، U_k سرعت فاز k ، F_{kl} جمله مربوط به تبادل ممنتم بین دو فاز k, l و τ_k تنسور تنش مربوط به فاز k به صورت زیر می باشد:

$$\tau_k = (\nabla U_k + \nabla U_k^T) - \frac{2}{3} \mu_k \nabla \cdot U_k I \quad (6)$$

نیروی بین فازهای درآگ به عنوان تنها نیروی تبادل ممنتم بین فازهای در نظر گرفته می شود:

$$F_{kl} = \frac{3}{4} \rho_L \alpha_G \frac{C_D}{d_b} |U_L - U_G| (U_L - U_G) \quad (7)$$

که C_D از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$C_D = \frac{4}{3} \frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_L} g d_b \frac{1}{V_b^2} \quad (8)$$

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

$$\frac{\partial(\alpha_L \rho_L k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_L \rho_L U_L k) = \nabla \cdot \left(\alpha_L \frac{\mu_t}{\sigma_k} \nabla k \right) + \alpha_L (G - \rho_L \epsilon) \quad (9)$$

$$\frac{\partial(\alpha_L \rho_L \epsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_L \rho_L U_L \epsilon) = \nabla \cdot \left(\alpha_L \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon \right) + \alpha_L \frac{\epsilon}{k} (C_2 G - C_2 \rho_L \epsilon) \quad (10)$$

$$G = \mu_L (\nabla U_L + \nabla U_L^T) : \nabla U_L \quad (11)$$

محدوده ای، رژیم عملیاتی ستون حبابی رژیم جریان حبابی^۱ همگن نامیده می شود و اندازه حبابها در یک محدوده کم و تقریباً یکنواخت که معمولاً ۱ تا ۷ میلی متر است، قرار می گیرد. با افزایش سرعت ظاهری گاز، به هم پیوستن حبابها اتفاق می افتد که باعث تشکیل حبابهای بزرگ (با سرعت صعود بالاتر) می شود. تشکیل اولین حباب بزرگ باعث تغییر رژیم هیدرودینامیکی سیستم می شود. رژیم هیدرودینامیکی در سرعت های بیش از مقدار سرعت گذرا معمولاً رژیم جریان ناهمگن^۲ نامیده می شود [۱۲ و ۱۳]. در رژیم جریان ناهمگن، حبابهای کوچک به هم می پیوندند و حبابهای بزرگ تر با اندازه قطر ۲۰ تا ۷۰ میلی متر تشکیل می دهند [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 می شود:

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

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

$$U_{trans} = V_{small} \alpha_{trans} (1 - \alpha_{trans}) \quad (2)$$

که در آن:

$$V_{small} = \frac{1}{2.84 \rho_G^{0.04}} \sigma^{0.12} \quad (3)$$

طبق این رابطه و در نظر گرفتن کشش سطحی فاز مایع، σ ، معادل 0.073 N/m و به کارگیری خواص فیزیکی ارائه شده در جدول (۲- الف)، سرعت ظاهری گاز در نقطه گذرای رژیم جریان مقدار 0.031 متر بر ثانیه محاسبه می شود [۱۵].

جدول ۲ الف - مقادیر عددی خواص فاز مایع و گاز مورد استفاده در مدل سازی [۱۵].

خاصیت	فاز مایع (سوخت)	فاز گاز (هیدروژن)
ضریب نفوذ $(D) \text{ cm}^2/\text{sec}$	۰/۰۰۰۰۳	۰/۳
دانسیته $(\rho) \text{ kg/m}^3$	۸۱۲	۱/۶

جدول ۲ ب - مقادیر عددی پارامترهای مورد استفاده در مدل سازی [۱۵].

پارامتر	مقدار عددی
ضریب انتقال جرم هیدروژن $(k_L) \text{ m/sec}$	۰/۰۰۰۰۴
ثابت تعادل هیدروژن m بدون بعد	۲۰

1- Bubbly Flow
2- Heterogeneous or Churn-turbulent

فاز مایع و گاز برحسب m^2/m^3 به صورت زیر می باشد:

$$a = \frac{6\alpha_L}{d_p} \quad (19)$$

و C_L^* غلظت تعادلی هیدروژن در فاز مایع به صورت زیر می باشد:

$$C_L^* = H P_G = m C_G \quad (20)$$

که H ثابت هنری برای هیدروژن و P_G فشار جزئی هیدروژن در فاز گاز و m ثابت تعادل هیدروژن می باشد.

۲-۴-۱ ایجاد مش و شرایط مرزی

ستون حبابی با قطر ۰/۱ و ارتفاع ۱/۰ متر توسط شبکه دوبعدی و با ۶۲۵۰ مش (Z: ۲۵×۲۵) شبیه سازی شد. برای بررسی اثر تعداد مش بر محاسبات، نتایج کسر حجمی گاز در مایع در سرعت ظاهری گاز معادل ۲ سانتی متر بر ثانیه برای شبکه های 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 تعداد مش بیشتر نه تنها تأثیری در نتایج محاسبات هیدرودینامیک و انتقال جرم ندارد، بلکه زمان و حجم محاسبات را نیز افزایش می دهد.

اندازه قطر حبابها ثابت و برابر ۴ میلی متر در نظر گرفته شده است. همچنین از شکستن و بهم پیوستن حبابها صرف نظر شده است. در این تحقیق، کف راکتور که هیدروژن خالص از آنجا توزیع می شود، به عنوان شرط مرزی سرعت ورودی در نظر گرفته شده است. بالای راکتور به عنوان شرط مرزی فشار خروجی فرض شد. شرط مرزی بدون لغزش نیز در دیواره راکتور در نظر گرفته شد و شار انتقال جرم در این دیواره برابر صفر فرض شد.

۲-۵-۱ روش حل

برای حل مدل CFD در این مقاله، نرم افزار 6.2.3 Fluent به کار گرفته شد. برای حل جملات همرفتی در روابط ممنتیم از روش هیبرید^۱ استفاده شده است. روش جفت کردن روابط سرعت - فشار نیز روش SIMPLE^۲ می باشد. شبیه سازی برای سرعت ظاهری گاز ورودی کمتر از ۳/۱ سانتی متر بر ثانیه انجام شد. برای هر شبیه سازی ابتدا هیدرودینامیک سیستم به صورت دینامیک با گام زمانی ۰/۰۰۲ ثانیه حل شد تا شرایط پایا که در آن تمام متغیرها ثابت می ماند، به دست آید. سپس نتایج حالت پایای هیدرودینامیک برای شروع محاسبات انتقال جرم به کار رفت که در آن روابط هیدرودینامیکی حل نمی شد.

$$\mu_t = \rho_L C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (12)$$

که G شدت تولید آشفته گی و μ_t ویسکوزیته جریان آشفته می باشد. برای حباب های کوچک، ضریب دراگ از رابطه زیر محاسبه می شود [۱۷]:

$$C_D = \frac{2}{3} \sqrt{Eo} \quad (13)$$

که:

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

که در آن، d_b قطر حباب، ρ_L دانسیته فاز مایع و ρ_G دانسیته فاز گاز می باشد. برای صعود یک حباب در مایع ساکن، سرعت صعود می تواند از رابطه ضریب دراگ به دست آید:

$$V_b = \sqrt{\frac{(\rho_L - \rho_G)g}{\left(\frac{3}{4}\right)\left(\frac{C_D}{d_b}\right)\rho_L}} \quad (15)$$

۲-۳-۱ مدل انتقال جرم

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

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k C_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k C_k) = \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k D_k \nabla C_k) \pm \rho_k F_{GL} \quad (16)$$

که C_k و D_k به ترتیب غلظت و ضریب نفوذ هیدروژن در فاز k و F_{GL} میزان انتقال جرم هیدروژن بین فاز گاز و مایع در فصل مشترک فازها به صورت زیر می باشد:

$$F_{GL} = K_L a (C_L^* - C_L) \quad (17)$$

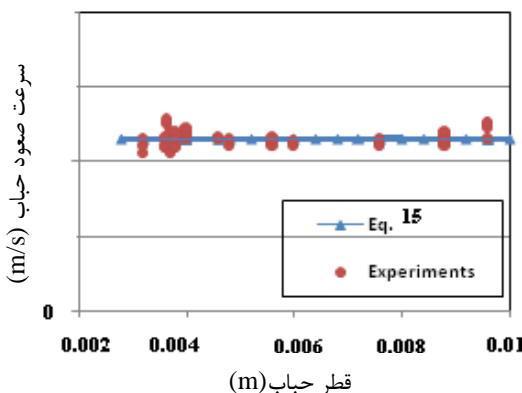
که K_L ضریب انتقال جرم کلی هیدروژن می باشد. عموماً ضریب انتقال جرم کلی به صورت زیر بیان می شود:

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{m k_G} - \frac{1}{k_L} \quad (18)$$

معمولاً و به ویژه در این حالت خاص که انتقال جرم هیدروژن از فاز گاز به مایع صورت می گیرد، مقاومت فاز مایع کنترل کننده انتقال جرم می باشد، یعنی: $k_L \ll k_G m$ و در نتیجه: $K_L = k_L$ سطح مشترک

1- Hybrid

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



شکل ۲- 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 صحت‌گذاری 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]:

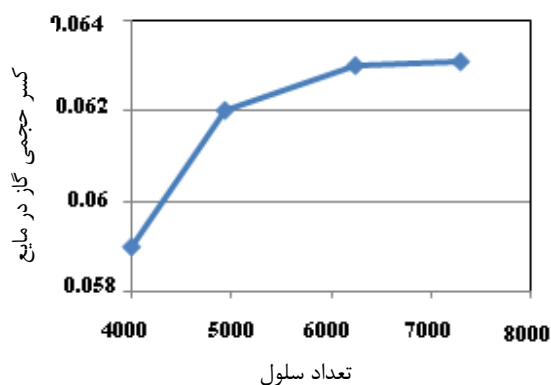
$$\alpha = \frac{U}{0.3+U} \quad (21)$$

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 ۰/۰۹۱ می‌باشد. مقایسه داده‌های محاسبه شده توسط مدل، تطابق خوبی با کسر حجمی محاسبه شده توسط رابطه (۲۴) دارد.

مقادیر عددی کسر حجمی گاز در مایع رسم شده در شکل (۳)، مقادیر متوسط‌گیری شده در کل سطح محاسباتی مدل می‌باشد. به‌عبارتی متوسط سطحی پارامتر کسر حجمی گاز در مایع به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$\alpha = \frac{\int \alpha dA}{\int dA} \quad (22)$$

برای درک بهتر موضوع، نمودار توزیع شعاعی سرعت محوری مایع و کسر حجمی گاز در مایع برای سرعت ظاهری گاز معادل ۲ سانتی‌متر



شکل ۱- نمودار استقلال نتایج کسر حجمی گاز در مایع از تعداد سلول.

به‌عبارتی در حین انجام محاسبات انتقال جرم، هیدرودینامیک حالت پایا در نظر گرفته شد. جدول (۲) مقادیر عددی خواص و پارامترهای به‌کار 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 اندازه‌گیری 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 مطمئن را به‌همراه دارد، زیرا سرعت حباب صعود کننده، تعیین کننده هیدرودینامیک سیستم و سرعت فاز مایع می‌باشد.

حباب صعود کننده، مطابق رابطه (۱۵) روی ضریب دراک تأثیرگذار است و به‌علت تأثیر ضریب دراک روی نیروی بین فازی (تبادل ممنتیم بین فازی) مطابق روابط قسمت (۲-۲)، تعیین کننده سرعت فاز مایع می‌باشد. سرعت فاز مایع نیز مطابق رابطه (۱۶) قسمت (۲-۳)، بر انتقال جرم بین فازی تأثیرگذار 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 ۰/۲۳ 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 در نظر گرفته شده است.

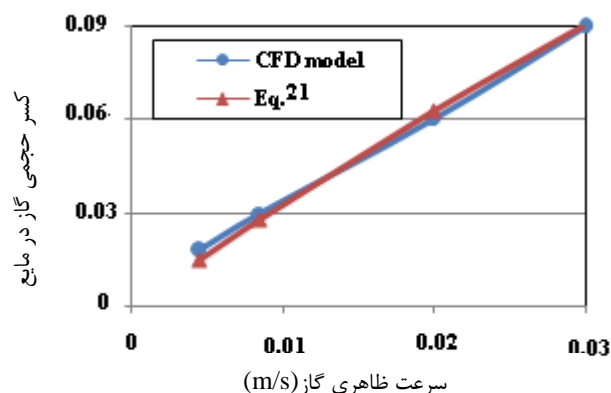
این نتایج با روابط (۲۳) و (۲۴) ضریب انتقال جرم حجمی در مقادیر مختلف سرعت ظاهری گاز ورودی را نشان می‌دهد. مطابق این شکل با افزایش سرعت ظاهری گاز، ضریب انتقال جرم حجمی افزایش می‌یابد و برای سرعت‌های ظاهری گاز تا ۳ سانتی‌متر بر ثانیه، مقادیر به‌دست آمده ضرایب انتقال جرم حجمی توسط مدل تا مقدار 0.054 s^{-1} می‌باشد. در اینجا نیز مقایسه داده‌های محاسبه شده توسط مدل تطابق خوبی، با کسر حجمی محاسبه شده توسط روابط تئوری دارد. از طرفی همان‌طور که مشاهده می‌شود، شیوه تغییرات ضریب انتقال جرم حجمی با سرعت ظاهری گاز، از نمودار کسر حجمی گاز در مایع پیروی می‌کند و شیوه تغییرات مشابهی را نشان می‌دهد. مقادیر عددی ضرایب انتقال جرم حجمی گاز در مایع رسم شده در شکل (۵) نیز مقادیر متوسط‌گیری شده در کل سطح محاسباتی مدل مطابق رابطه (۲۲) می‌باشد.

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 متوسط‌گیری شده داده‌های ضریب انتقال جرم حجمی شکل (۶) در سرعت ظاهری گاز معادل 0.36 s^{-1} معادل (۲۲) توسط رابطه (۲۲) معادل 0.36 s^{-1} می‌باشد 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 جرم حجمی 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 0.0004 متر بر ثانیه، زمان ۱۲۰ ثانیه نیاز است تا غلظت هیدروژن در فاز مایع به غلظت تعادلی خود برسد. از طرفی هر چه 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 0.0008 و 0.002 نیز انجام و نتایج این ضریب بر غلظت هیدروژن در فاز مایع با یکدیگر 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 0.0004 ، 0.0008 و 0.002 متر بر ثانیه، زمان لازم برای رسیدن غلظت هیدروژن به حالت تعادل در فاز مایع، به‌ترتیب معادل ۱۲۰، ۶۰ و ۲۵ ثانیه می‌باشد. به‌عبارتی 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 زمان‌ها، به‌علت اختلاف در ضریب انتقال جرم حجمی گاز در مایع می‌باشد که ضریب انتقال جرم حجمی نیز خود

بر ثانیه مربوط به شکل (۳) در شکل (۴) رسم شده است. مقدار متوسط‌گیری شده داده‌های کسر حجمی گاز در مایع شکل (۴-ب) در سرعت ظاهری گاز معادل ۲ سانتی‌متر بر ثانیه، توسط رابطه (۲۲) معادل 0.063 می‌باشد که این مقادیر در شکل (۳) قابل مشاهده است. مطابق شکل (۴-الف)، در مرکز ستون حبایی، حداکثر سرعت معادل 0.22 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 در نتیجه حداکثر انتقال جرم در مرکز ستون می‌شود. همچنین میزان کسر حجمی و سرعت محوری مایع، با حرکت در جهت شعاعی کاهش می‌یابد که منجر به کاهش ضریب انتقال جرم حجمی در جهت شعاعی می‌شود.



شکل ۳- نمودار تغییرات کسر حجمی گاز در مایع با سرعت ظاهری گاز ورودی.

۳-۲- 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 صحت‌گذاری 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 (۲۳) و (۲۴) که به‌ترتیب توسط آکیتا [۲۰] و میرون [۲۱] پیشنهاد شده‌اند، استفاده شد:

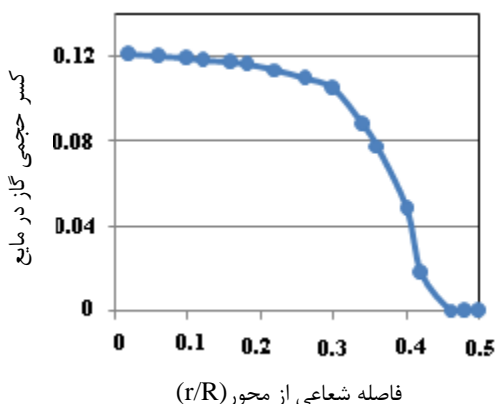
$$k_{La} = D_C^{0.17} U^{0.7} \quad (23)$$

$$k_{La} = \frac{0.874}{U^{-0.979-1}} \quad (24)$$

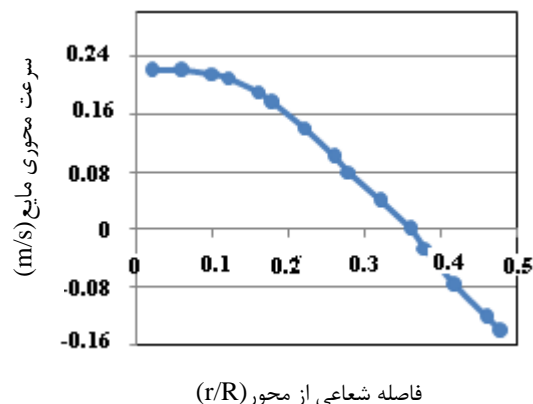
که D_C قطر ستون برحسب متر، U سرعت ظاهری گاز برحسب متر بر ثانیه و k_{La} ضریب انتقال جرم حجمی برحسب s^{-1} می‌باشد. شکل (۵) نتایج ضریب انتقال جرم حجمی محاسبه شده توسط مدل و مقایسه

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 در نتیجه بالاترین مقدار ضریب انتقال جرم گاز-مایع، بهترین عملکرد انحلال هیدروژن در سوخت هیدروکربنی به دست خواهد آمد. در نهایت می توان گفت که با انتخاب هندسه و شرایط عملیاتی مناسب سیستم، می توان مقادیر مناسب سرعت و توزیع گاز، ضریب انتقال جرم و در نتیجه شرایط مطلوب توزیع گاز در مایع و زمان رسیدن غلظت گاز به غلظت تعادلی در فاز مایع را تأمین کرد.

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

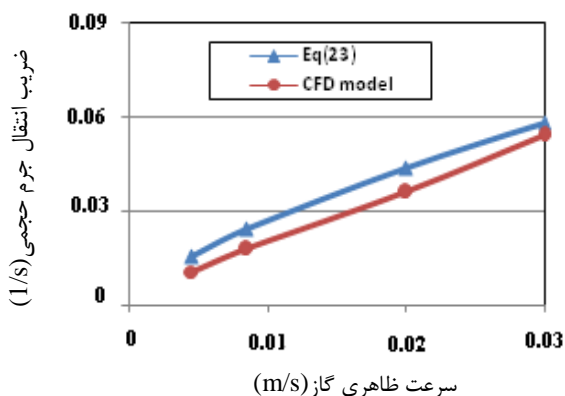


ب)

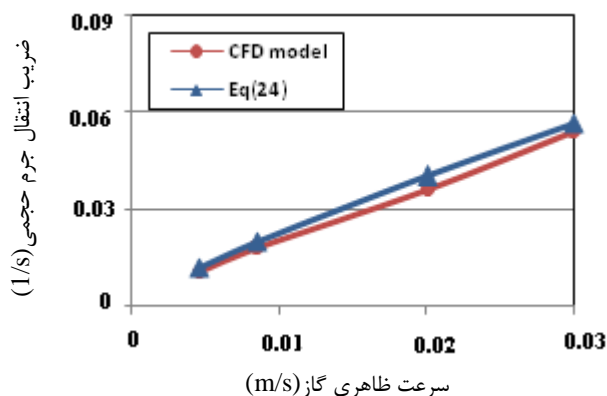


الف)

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

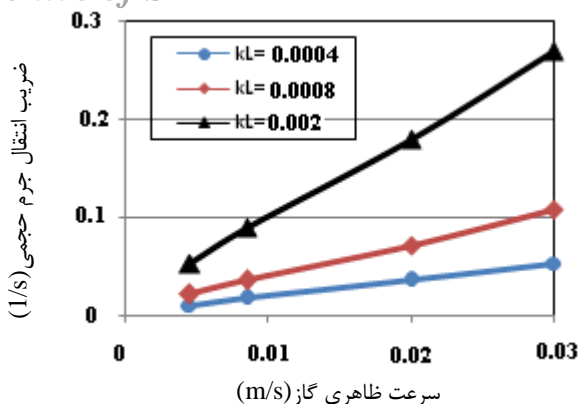


ب)

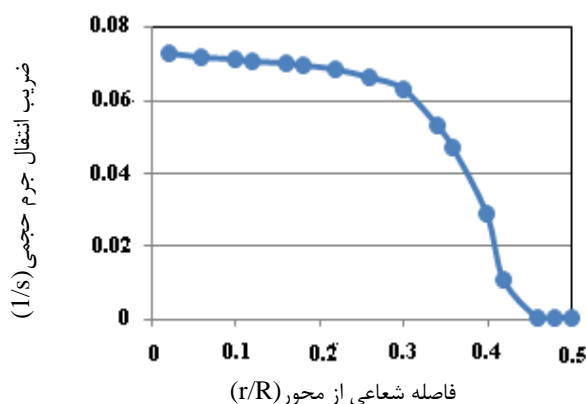


الف)

شکل ۵- نمودار تغییرات ضریب انتقال جرم حجمی با سرعت ظاهری گاز ورودی. الف) رابطه (۲۴)، ب) رابطه (۲۳).



شکل ۹- مقایسه تغییرات ضریب انتقال جرم حجمی با سرعت ظاهری گاز برای ضریب انتقال جرم 0.0004 ، 0.0008 و 0.002 متر بر ثانیه.



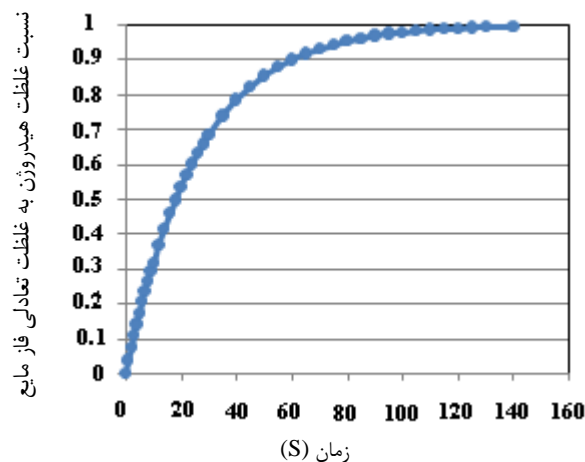
شکل ۶- نمودار توزیع شعاعی ضریب انتقال جرم حجمی (سرعت ظاهری گاز معادل ۲ سانتی متر بر ثانیه).

۴- نتیجه گیری

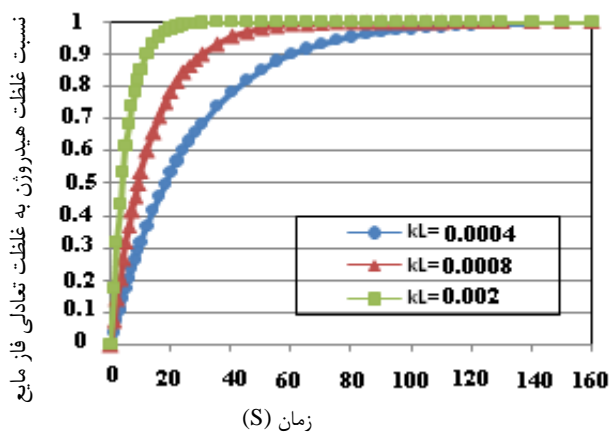
برای بررسی انحلال هیدروژن در یک سوخت مایع هیدروکربنی بومی، یک مدل دو بعدی CFD در راکتور ستون حبابی به کار رفته است. راکتور با قطر و ارتفاع 0.1 و 1.0 متر با هیدروکربن پر شده است و هیدروژن با سرعت ورودی کمتر از $3/1$ سانتی متر بر ثانیه داخل آن توزیع می شود. برای هر شبیه سازی ابتدا هیدرودینامیک سیستم به صورت دینامیک حل می شود و سپس نتایج حالت پایای هیدرودینامیک برای حل مدل انتقال جرم استفاده می شود. برای اطمینان از صحت مدل به کار رفته، ابتدا سرعت محاسبه شده برای صعود حباب گاز با داده های آزمایشگاهی مقایسه شد که این مقایسه تطابق خوبی نشان داد. همچنین ضریب انتقال جرم و کسر حجمی محاسبه شده توسط مدل موجود نیز با روابط تئوری مقایسه شد که این مقایسه هم تطابق خوبی نشان داد. از طرفی نتایج به دست آمده توسط مدل نشان داد که با افزایش سرعت ظاهری گاز، کسر حجمی گاز در مایع و ضریب انتقال جرم افزایش می یابد. همچنین نتایج نشان داد که غلظت هیدروژن در سوخت مایع با گذشت زمان افزایش می یابد تا به مقدار تعادلی خود در مایع برسد و با افزایش ضریب انتقال جرم هیدروژن در سوخت هیدروکربنی، این زمان کاهش می یابد. بنابراین با انتخاب هندسه و شرایط عملیاتی مناسب سیستم، می توان مقادیر مناسب سرعت گاز و ضریب انتقال جرم و در نتیجه شرایط مطلوب توزیع گاز در مایع، و زمان رسیدن به غلظت تعادلی هیدروژن در مایع را تأمین کرد.

مراجع

- [1] "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.



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



شکل ۸- مقایسه تغییرات غلظت هیدروژن در فاز مایع با زمان تا رسیدن به غلظت تعادلی با ضرایب انتقال جرم 0.0004 ، 0.0008 و 0.002 متر بر ثانیه (سرعت ظاهری گاز معادل ۲ سانتی متر بر ثانیه).

- [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'Connell, 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. Chemistry 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.; Ellenberger, J.; Krishna, 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.