



چهارمین کنفرانس مشعل و کوره‌های صنعتی

تهران، ۲۹ خرداد ۱۳۹۳ هجری: هم‌اندیشان انرژی کیمیا

www.Koureh.ir

تلفن تهران: ۸۸۶۷۱۶۷۶

مدل‌سازی ریاضی شعله‌های آرام در محفظه‌ی احتراق تبدیل‌کننده‌های خودگرمایی

تولید گاز سنتز

سپیده اسدی^۱، عطاء اله ساری^۲

گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان

asadi.sepideh@gmail.com

چکیده

در این پژوهش، رفتار شعله‌ای با جریان آرام در محفظه‌ی احتراق یک تبدیل‌کننده‌ی خودگرمایی به صورت یک بعدی در شرایط فشار ثابت مدل شده است. با توجه به اینکه در راکتورهای تبدیل خودگرمایی، خوراک ورودی و انرژی مورد نیاز برای واکنش‌های تبدیل با بخار آب از طریق انجام واکنش احتراق ناقص تامین می‌شوند، عملکرد محفظه‌ی احتراق بر عملکرد کلی راکتور تأثیر زیادی دارد. از این‌رو، واکنش‌های اکسیداسیون متان، از طریق یکی از دقیق‌ترین ریزمکانیسم‌های موجود، مکانیسم GRI 3.0 شامل ۵۳ جزء و ۳۲۵ واکنش برگشت‌پذیر، اعمال شده‌اند. با استفاده از این مدل، امکان محاسبه‌ی طول شعله، با هدف جانمایی دقیق بستر کاتالیستی و افزایش عمر مفید دانه‌های کاتالیستی در تبدیل‌کننده‌های خودگرمایی، وجود دارد. معادلات این مدل با استفاده از الگوریتم نیوتن و انتگرال‌گیری زمانی حل شده‌اند. به این منظور از زیربرنامه‌ی تجاری TWOPNT در محیط برنامه‌نویسی فرترن استفاده شده است. با استفاده از نتایج حل عددی این مدل، امکان بررسی پروفایل‌های دما، سرعت و غلظت اجزاء در طول شعله وجود دارد. در این پژوهش، اثر تغییر نسبت کسر مولی اکسیژن به متان و دمای پیش‌گرمی خوراک ورودی بر طول موثر شعله بررسی شده است. از نتایج این مدل می‌توان به‌عنوان ورودی برای مدل‌سازی رفتار بستر کاتالیستی در تبدیل‌کننده‌های خودگرمایی استفاده کرد.

واژه‌های کلیدی: احتراق ناقص، تبدیل‌کننده خودگرمایی، شعله، محفظه احتراق، گاز سنتز

^۱ دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه اصفهان

^۲ استادیار گروه مهندسی شیمی، دانشگاه اصفهان



چهارمین کنفرانس مشعل و کوره‌های صنعتی

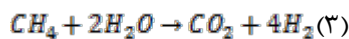
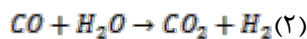
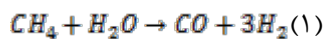
تهران، ۲۹ خرداد ۱۳۹۳ هجری: هم‌اندیشان انرژی کیمیا

www.Koureh.ir

تلفن تهران: ۸۸۶۷۱۶۷۶

۱-مقدمه

گاز سنتز، مخلوطی از گازهای هیدروژن و مونواکسید کربن، یکی از مهم‌ترین ترکیبات حد واسط در صنایع شیمیایی برای تولید موادی مانند آمونیاک و متانول است [۱]. امروزه دست یابی به فناوری کارآمد برای تولید این مخلوط از گاز طبیعی دارای اهمیت بالایی است. تبدیل با بخار آب (Steam Reforming) و احتراق ناقص (Partial Oxidation) دو روش متداول برای تولید این مخلوط هستند. مرسوم‌ترین روش برای تولید گاز سنتز در مقیاس صنعتی، تبدیل با بخار آب است و گاز طبیعی معمول‌ترین ماده‌ایست که به‌عنوان خوراک برای این فرآیند استفاده می‌شود [۲]. تبدیل با بخار آب از سه واکنش برگشت پذیر تشکیل شده است که در مجموع گرماگیری بالایی دارند:



گرمای لازم برای انجام این فرآیند معمولاً از طریق واکنش احتراق سوخت‌های فسیلی در کوره تأمین می‌شود. در سال‌های اخیر، در صنایع پتروشیمی استفاده از روش تبدیل مواد هیدروکربنی با بخار آب، به دلیل هزینه‌های زیاد مربوط به مصرف انرژی، تولید محصول با نسبت زیاد هیدروژن به مونواکسید کربن و خورنده بودن بخار آب محدود شده است [۳]. برای تولید گاز سنتز می‌توان از اکسیداسیون جزئی به صورت کاتالیستی و غیر کاتالیستی نیز استفاده کرد. در اینفرآیند، مقدار اکسیژن موجود کمتر از مقدار استوکیومتری واکنش است که منجر به تولید هیدروژن و مونواکسید کربن می‌شود. در صورت استفاده از روش غیر کاتالیستی، انجام واکنش به دمای عملیاتی بالاتری نیاز دارد [۴]. در این سیستم، وجود اتلاف حرارتی منجر به کاهش راندمان کلی انرژی می‌شود.

نیاز به وجود منبع حرارت خارجی در فرآیند تبدیل با بخار آب و اتلاف زیاد انرژی در فرآیند احتراق ناقص، لزوم توسعه روش‌های نوین برای تبدیل گاز طبیعی به گاز سنتز را به وجود آورده است. یکی از این روش‌ها تبدیل خودگرمایی (Autothermal Reforming) است. در این فرآیند، گرمایشی از احتراق ناقص، برای انجام واکنش گرماگیر تبدیل با بخار آب در بستر کاتالیست مصرف می‌شود و از این طریق هم بیشینه‌ی دمای قابل وقوع در راکتور کاهش می‌یابد و هم راندمان مصرف انرژی افزایش پیدا می‌کند [۴].

از مزیت‌های استفاده از روش تبدیل خودگرمایی نسبت به سایر روش‌ها می‌توان به کوچک بودن اندازه‌ی واحد، نیاز به دمای عملیاتی پایین‌تر، سهولت آغاز به کار و امکان پذیرش خوراک ورودی متنوع اشاره کرد [۵]. این روش در مقایسه با روش تبدیل با بخار آب به بخار آب کمتری نیاز دارد و عملاً تمام گرمای لازم برای انجام واکنش‌های تبدیلی از طریق واکنش‌های اکسیداسیون محفظه احتراق تأمین می‌شود و نیازی به استفاده از منبع خارجی برای تولید حرارت وجود ندارد [۴]. بهره‌ی تولید هیدروژن به وسیله‌ی واکنش تبدیل خودگرمایی، از اکسیداسیون جزئی غیر کاتالیستی متان بیشتر است که این نشان دهنده‌ی مزیت ترکیب واکنش‌های اکسیداسیون و واکنش‌های تبدیلی است [۶].

راکتور تبدیل خودگرمایی صنعتی از دو بخش تشکیل شده است: محفظه مربوط به واکنش احتراق ناقص (کاتالیستی یا غیر کاتالیستی) و بستر ثابت کاتالیستی. به طور کلی دو نوع سیستم تبدیل خودگرمایی وجود دارد: در نوع اول، واکنش‌های گرمای اکسیداسیون و گرماگیر تبدیلی در یک بستر کاتالیستی واحد یا دو بستر کاتالیستی مجزای مجاور یکدیگر انجام



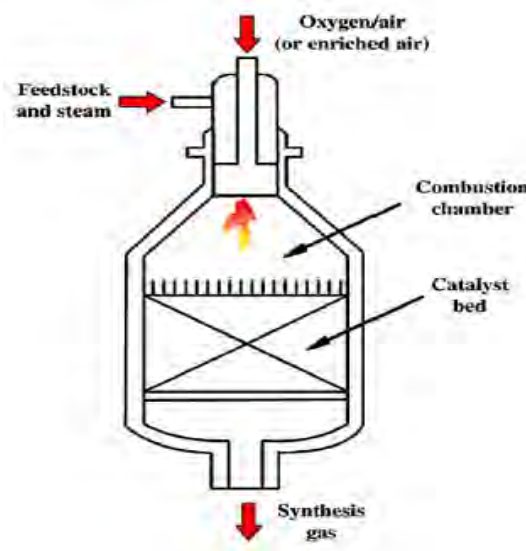
چهارمین کنفرانس مشعل و کوره‌های صنعتی

تهران، ۲۹ خرداد ۱۳۹۳ هجری: هم‌اندیشان انرژی کیمیا

www.Koureh.ir

تلفن تهران: ۸۸۶۷۱۶۷۶

می‌شوند. این نوع از راکتورها به دلیل استفاده از کاتالیست‌های بسیار فعالی همانند رودیوم و پلاتینوم می‌توانند در ابعاد بسیار کوچکی (در حد چند میلی‌متر) ساخته‌شوند و به‌عنوان منبع متحرک تولید هیدروژن جهت استفاده در پیل‌های سوختی قابل تعبیه در اتومبیل‌ها مورد استفاده قرار گیرند. نوع دوم این راکتورها از دو قسمت مجزا تشکیل شده‌است، فرآیند اکسیداسیون غیرکاتالیستی توسط یک مشعل در محفظه‌ی احتراق صورت گرفته و واکنش تبدیلمتان باقی مانده با بخار آب، روی بستری از کاتالیست‌های نیکل انجام می‌شود [۷]. در این نوع از تبدیل‌کننده‌ها، گرمای لازم برای انجام واکنش‌های گرماگیر تبدیلی از توده‌ی جریان گازهای گرم حاصل از احتراق تأمین می‌شود. گاز سنتز در مقیاس صنعتی با استفاده از نوع دوم این تبدیل‌کننده تولید می‌شود. شکل ۱- نمایی از راکتور تبدیل خودگرمایی نوع دوم را نشان می‌دهد.



شکل ۱- نمایی از راکتور تبدیل خودگرمایی نوع دوم [۳]

بهینه‌سازی عملکرد راکتور تبدیل خودگرمایی برای دست‌یابی به بیشینه‌ی مقدار بهره‌ی تولید هیدروژن، از طریق روش‌های سعی و خطایی امکان‌پذیر نبوده و انجام محاسبات پیچیده و تکراری برای بررسی اثر پارامترهای مختلف ضروری است. با توجه به‌اینکه در راکتورهای تبدیل خودگرمایی، خوراک ورودی و انرژی مورد نیاز برای انجام واکنش تبدیل با بخار آب از طریق انجام واکنش احتراق ناقص تأمین می‌شود، عملکرد محفظه‌ی احتراق بر عملکرد کلی راکتور تأثیر زیادی دارد. مطالب منتشر شده در مورد مدل‌سازی ریاضی فرآیند تبدیل خودگرمایی اغلب مربوط به نوع اول آن است که واکنش‌های اکسیداسیون و تبدیلی به‌صورت هم‌زمان در بستر کاتالیستی انجام می‌شوند و تعداد آثار منتشر شده در مورد نوع دوم این تبدیل‌کننده که در آن واکنش‌های اکسیداسیون به صورت غیرکاتالیستی توسط مشعل انجام می‌شوند، بسیار اندک است. مطالعه‌ی هم‌زمان هیدرودینامیک سیال و سینتیک واکنش‌های احتراق در راکتورهای صنعتی، که معمولاً دارای شعله‌های نفوذکننده با رژیم جریان آشفته هستند، بسیار پیچیده است. بنابراین در اغلب پژوهش‌های موجود، مدل‌سازی رفتار محفظه‌ی احتراق با فرض‌های ساده‌کننده‌ی زیادی همراه بوده است. در پژوهش انجام شده توسط پینا و باریو [۸] عملکرد پایای تبدیل‌کننده‌ی خودگرمایی نوع دوم به‌صورت دو راکتور سری، مدل‌سازی و شبیه‌سازی شده‌است. برای مدل‌کردن رفتار محفظه‌ی



احتراق از موازنه کلی جرم، انرژی و معادلات تعادلی استفاده شده است. در این مدل‌سازی، امکان انجام واکنش تبدیل متان با بخار آب و انتقال آب-گاز به صورت همگن در محفظه احتراق در نظر گرفته شده است. برای بیان مکانیسم انجام واکنش‌های تبدیل متان با بخار آب و انتقال آب-گاز از سینتیک ذاتی این واکنش‌ها استفاده شده است. با وجود اینکه واکنش‌های رادیکالی زیادی در حین احتراق متان صورت می‌گیرد، برای مدل کردن احتراق، تنها واکنش احتراق ناقص متان که منجر به تولید هیدروژن و مونواکسید کربن می‌شود، در نظر گرفته شده است.

در پژوهش انجام شده توسط زاهدی نژاد و همکاران [۷]، مدل‌سازی و شبیه‌سازی فرآیند تبدیل خودگرمایی متان برای تولید گاز سنتز انجام شده است. در این پژوهش، تبدیل کننده از دو قسمت مجزای مربوط به انجام واکنش‌های اکسیداسیون غیرکاتالیستی و فرآیند کاتالیستی تبدیل متان با بخار آب تشکیل شده است. به دلیل اینکه مطالعه هم‌زمان هیدرودینامیک و سینتیک بخش احتراق راکتورهای صنعتی بسیار پیچیده است، برای ساده کردن حل مسأله، سرعت واکنش‌های شیمیایی محفظه‌ی احتراق، مستقل از هیدرودینامیک سیستم در نظر گرفته شده و قسمت احتراق به صورت یک راکتور کاملاً آمیخته مدل شده است. مکانیسم در نظر گرفته شده برای مدل کردن رفتار واکنش‌های احتراق شامل ۱۰۸ واکنش ابتدایی با ۲۸ جزء است. تبدیل کننده به صورت آدیاباتیک و فشار ثابت مدل شده که به رفتار راکتورهای صنعتی نزدیک است.

در پژوهش انجام شده توسط زمانیان و همکاران [۳]، در مدل‌سازی تبدیل کننده‌های خودگرمایی نوع دوم، محفظه احتراق به صورت یک راکتور کاملاً آمیخته مدل شده است. در این پژوهش، برای بیان سینتیک واکنش‌های احتراق از مکانیسم ارائه شده توسط زو و همکارانش استفاده شده است.

در پژوهش انجام شده توسط امیرشقایق و همکاران [۹]، شبیه‌سازی احتراق ناقص متان در مشعل و محفظه‌ی احتراق راکتور تبدیل خودگرمایی، به وسیله‌ی نرم‌افزار FLUENT انجام شده است. این شبیه‌سازی برای حالت پایا انجام شده و از یک مکانیسم دو مرحله‌ای برای بیان سینتیک احتراق واکنش‌های فاز گاز استفاده شده است. در این پژوهش، مدل‌سازی به صورت سه‌بعدی و با فرض تقارن شعله در جهت محوری انجام شده است. در نهایت، اثر نسبت اکسیژن به متان و دمای خوراک ورودی بر نسبت هیدروژن به مونواکسید کربن موجود در محصول و درصد تبدیل متان مورد بررسی قرار گرفته است.

در این پژوهش، مدل‌سازی ریاضی شعله با رژیم جریان آرام در محفظه احتراق راکتور تبدیل خودگرمایی انجام شده است. در مطالعات پیشین، با توجه به وجود رژیم جریان آشفته در محفظه احتراق راکتورهای صنعتی، این بخش به صورت یک راکتور کاملاً آمیخته در نظر گرفته شده و برای مدل‌سازی رفتار احتراقی فرآیند از واکنش‌های عمومی استفاده شده است. این واکنش‌ها نمی‌توانند رفتار سیستم‌های احتراق را به درستی پیش‌بینی نمایند و به دست آوردن توزیع دقیق دما و غلظت میسر نخواهد بود. با توجه به اثرپذیری واکنش‌های تبدیل کاتالیستی از عملکرد محفظه‌ی احتراق، مدل‌سازی دقیق آن ضروری به نظر می‌رسد، از این‌رو، بر خلاف مطالعات پیشین، با اعمال واکنش‌های احتراق از طریق ریز مکانیسم GRI 3.0، رفتار شعله به صورت دقیق‌تری مدل شده و توزیع دما و غلظت کلیه‌ی محصولات احتراق در طول شعله به دست آمده است. با مدل کردن عملکرد شعله می‌توان تاثیر تغییر شرایط عملیاتی بر طول شعله را بررسی کرد و با توجه به آن، فاصله مناسب قرارگیری سطح بستر کاتالیستی از مشعل را ارزیابی نمود.



در این پژوهش، رفتار شعله در محفظه احتراق راکتورهای تبدیل خودگرمایی با دبی کمو در شرایط پایا مدل شده است. با توجه به پایین بودن دبی، رژیم جریان به صورت آرام در نظر گرفته شده است. مدل کردن رفتار واکنش‌های احتراق متان با استفاده از مکانیسم GRI 3.0 (www.me.berkeley.edu/gri-mech)، شامل ۵۳ جزء و ۳۲۵ واکنش برگشت پذیر، صورت گرفته است. با توجه به دما و فشار عملیاتی، رفتار مخلوط واکنش با استفاده از قانون گازهای ایده‌ال مدل شده است. خواص ترمودینامیکی با استفاده از داده‌های موجود در منابع، محاسبه شده است [۱۱، ۱۰]. معادلات نهایی مدل به شرح زیر است:

معادله پیوستگی:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \quad (۴)$$

معادله بقاء اجزاء:

$$\rho \frac{\partial Y_K}{\partial t} + \rho u \frac{\partial Y_K}{\partial x} = -\frac{\partial j_{K,x}}{\partial x} + \dot{G}_K W_K \quad (۵)$$

معادله بقاء انرژی:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho u c_p \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \sum_{k=1}^K c_{p,k} j_{k,x} \frac{\partial T}{\partial x} - \sum_{k=1}^K h_k \dot{G}_k W_k \quad (۶)$$

معادله بقاء مومنتوم:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (۷)$$

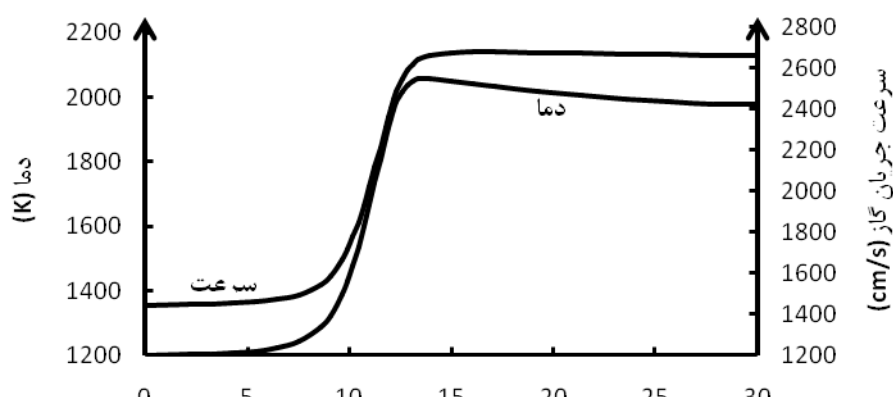
قانون گازهای ایده‌ال:

$$\rho = \frac{pW}{RT} \quad (۸)$$

برای حل عددی این معادلات، با استفاده از تقریب تفاضل محدود، معادلات مقدار مرزی به سیستمی از معادلات جبری تبدیل می‌شوند. در ابتدا مقادیر تقریبی متغیرها برای تعداد محدودی از گره‌ها در محدوده‌ی حل عددی بدست می‌آید. پس از به‌دست آمدن جواب معادلات در گره‌های اولیه، با توجه به شیب تغییر متغیرها، در صورت لزوم بر تعداد گره‌ها افزوده می‌شود. حل این سیستم جبری از معادلات با استفاده از الگوریتم نیوتن و زیر برنامه‌ی تجاری TWOPNT [۱۲] انجام شده است. در صورتیکه رسیدن به جواب با استفاده از الگوریتم نیوتن امکان‌پذیر نباشد، مقدار متغیرها با استفاده از انتگرال‌گیری زمانی معادلات به‌دست می‌آید و به‌عنوان حدس اولیه‌ی جدید برای الگوریتم نیوتن استفاده می‌شود. با حل این معادلات می‌توان پروفایل دما، سرعت و غلظت اجزا در طول شعله را به‌دست آورد.

۳- بحث و نتیجه

مجموعه معادلات مدل برای شرایط ورودی معمول در راکتورهای تبدیل خودگرمایی حل شده و پروفایل پارامترهای مختلف در طول موثر شعله به‌دست آمده‌اند.





چهارمین کنفرانس مشعل و کوره‌های صنعتی

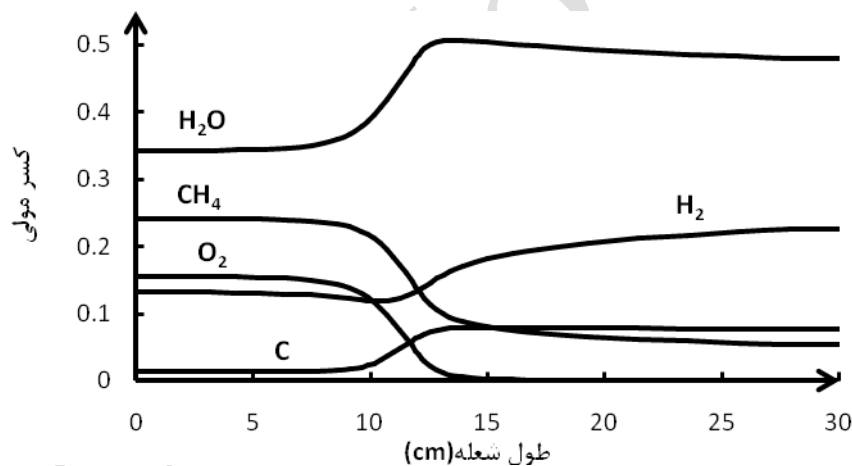
تهران، ۲۹ خرداد ۱۳۹۳ هجری: هم‌اندیشان انرژی کیمیا

www.Koureh.ir

تلفن تهران: ۸۸۶۷۱۶۷۶

شکل ۲- پروفایل دما و سرعت جریان گاز در طول شعله ($T_0=1200\text{ K}$, $p=36\text{ bar}$, $d=2.54\text{ cm}$, $\text{mass flow}=5000\text{ g/s}$)

شکل ۲ نمودار تغییرات دما و سرعت جریان گاز در طول شعله را نشان می‌دهد. در قسمت‌های ابتدایی شعله، به دلیل کافی نبودن دما و تامین نشدن انرژی لازم برای انجام واکنش‌های اکسیداسیون، این واکنش‌ها پیشرفت چندانی نداشته‌اند. در طول ۶ سانتی‌متری شعله، واکنش‌های اکسیداسیون آغاز شده و باعث تغییر دمای جریان گاز شده‌است. در محدوده‌ی ۹ تا ۱۲ سانتی‌متری از طول شعله، سرعت انجام واکنش‌های اکسیداسیون، شیب تغییرات دما و سرعت جریان گاز به حداکثر مقدار خود رسیده‌است. انبساط جریان گاز بر اثر افزایش دمای شعله منجر به افزایش سرعت آن شده‌است. با توجه به محدودکننده بودن مقدار اکسیژن، با کاهش مقدار آن، سرعت واکنش‌های احتراقی، دما و سرعت جریان گاز نیز کاهش یافته و به مقدار نهایی خود نزدیک شده‌است.

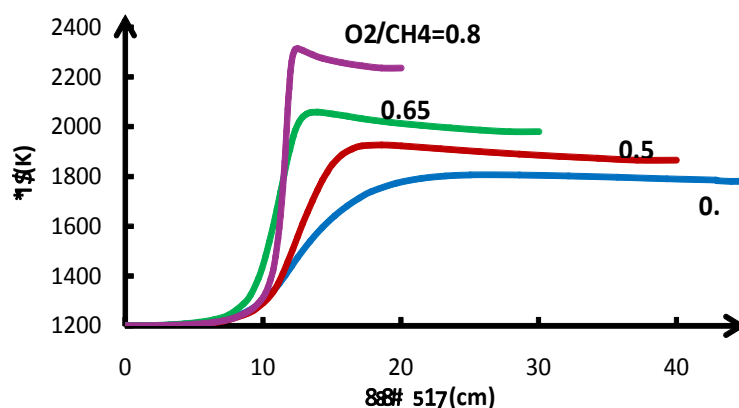


شکل ۳- پروفایل کسر مولی اجزاء در طول شعله ($T_0=1200\text{ K}$, $p=36\text{ bar}$, $d=2.54\text{ cm}$, $\text{mass flow}=5000\text{ g/s}$)

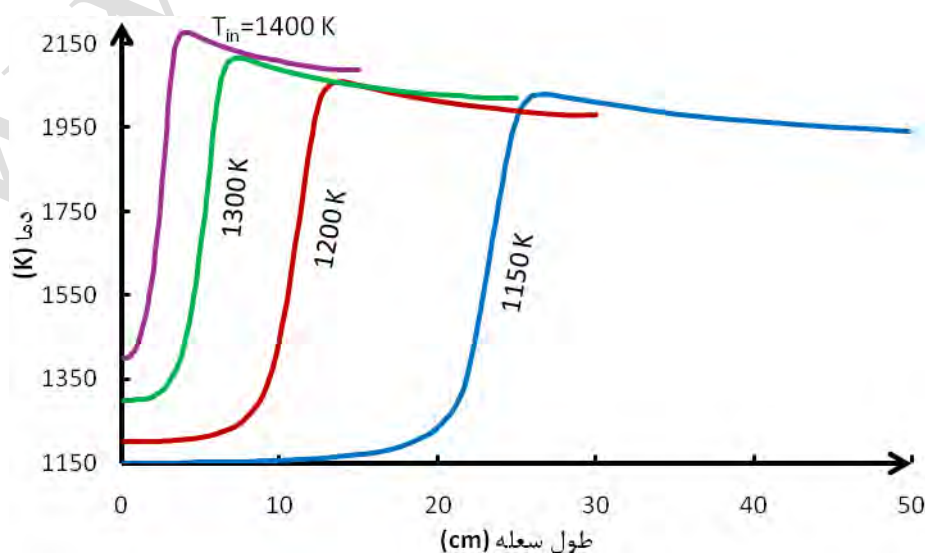
شکل ۳ پروفایل تغییرات کسر مولی اجزای شرکت‌کننده در واکنش‌های اکسیداسیون را نشان می‌دهد. جریان خوراک ورودی به محفظه‌ی احتراق شامل متان، اکسیژن، بخار آب، هیدروژن و مونواکسید کربن است. با توجه به محدودکننده بودن مقدار اکسیژن، با کاهش مقدار آن، سرعت واکنش‌های اکسیداسیون و شیب تغییرات کسر مولی مواد کاهش می‌یابد. با تولید هیدروژن، بخار آب و مونواکسید کربن در واکنش‌های احتراق ناقص، کسر مولی این اجزاء در طول شعله افزایش داشته‌است.



در نهایت، متان باقی مانده، بخار آب، هیدروژن و مونواکسید کربن به‌عنوان خوراک واکنش‌های تبدیل با بخار آب وارد بستر کاتالیستی می‌شوند. بیشینه‌یتغییرات در طول ۹ تا ۱۲ سانتی‌متری شعله صورت می‌گیرد که با نتایج شکل ۲ مطابقت دارد. با توجه به اینکه دانه‌های کاتالیستی موجود در بستر ثابت، نسبت به حرارت بسیار حساس هستند، محاسبه دقیق طول شعله و جانمایی مناسب بستر به افزایش طول عمر مفید دانه‌های کاتالیستی کمک می‌کند. در ادامه به بررسی اثر نسبت اکسیژن به متان در خوراک ورودی و دمای پیش گرمی خوراک بر طول موثر شعله پرداخته می‌شود. شکل ۴ اثر نسبت O_2/CH_4 خوراک بر طول موثر شعله نشان می‌دهد. با افزایش این کسر، واکنش‌های اکسیداسیون در طول کمتری از شعله آغاز می‌شوند و زمان لازم برای شعله ور شدن خوراک کاهش می‌یابد. با اتمام اکسیژن، سرعت واکنش‌های احتراق کاهش یافته و دمای شعله به مقدار نهایی خود نزدیک می‌شود. با افزایش کسر مولی اکسیژن، سرعت واکنش‌ها و سرعت مصرف اکسیژن افزایش یافته و دمای جریان گاز در طول کمتری از شعله به مقدار نهایی خود می‌رسد.



شکل ۴- بررسی اثر نسبت CH_4/O_2 خوراک بر طول شعله ($T_0=1200\text{ K}$, $p=36\text{ bar}$, $d=2.54\text{ cm}$, $\text{mass flow}=5000\text{ g/s}$)





چهارمین کنفرانس مشعل و کوره‌های صنعتی

تهران، ۲۹ خرداد ۱۳۹۳ هجری: هم‌اندیشان انرژی کیمیا

www.Koureh.ir

تلفن تهران: ۸۸۶۷۱۶۷۶

شکل ۵- بررسی اثر دمای پیش گرمی خوراک بر طول موثر شعله ($T_0=1200\text{ K}$, $p=36\text{ bar}$, $d=2.54\text{ cm}$, $\text{mass flow}=5000\text{ g/s}$)

شکل ۵ اثر دمای پیش گرمی خوراک بر طول موثر شعله را نشان می‌دهد. با افزایش دمای پیش گرمی خوراک، واکنش‌های اکسیداسیون در طول کمتری از شعله آغاز می‌شوند. افزایش دما سبب افزایش سرعت واکنش‌های اکسیداسیون می‌شود، بنابراین، اکسیژن در طول کمتری از شعله به مقدار نهایی خود رسیده و سرعت واکنش‌های اکسیداسیون کاهش می‌یابد. نتایج نمودار نشان می‌دهد که با افزایش دمای پیش گرم خوراک، طول لازم برای نهایی شدن دمای جریان گاز و رسیدن به شرایط تعادل کاهش می‌یابد.

۴- نتیجه گیری

مدل‌سازی ریاضی رفتار شعله‌ی آرام‌حاصل از مشعل محفظه‌ی احتراق یک راکتور تبدیل خودگرمایی، به صورت یک بعدی انجام‌شد. با استفاده از این مدل می‌توان پروفایل دما، سرعت جریان گاز و غلظت‌اجزاء را در طول موثر شعله محاسبه کرد. نتایج حل معادلات نشان می‌دهد که با افزایش نسبت کسر مولی اکسیژن به متان و دمای پیش گرمی خوراک می‌توان طول موثر شعله را کاهش داد. از نتایج این پژوهش می‌توان به عنوان ورودی برای مدل‌سازی رفتار بستر کاتالیستی در تبدیل‌کننده خودگرمایی استفاده کرد. محاسبه‌ی طول شعله در این مدل به‌جانمایی مناسب بستر کاتالیستی در تبدیل‌کننده خودگرمایی و افزایش طول عمر مفید دانه‌های کاتالیستی کمک می‌کند.

با توجه به ماهیت انفجاری مواد شرکت‌کننده در واکنش‌های احتراق و سرعت بالای این واکنش‌ها، امکان اندازه‌گیری پارامترها به صورت آزمایشگاهی یا صنعتی وجود ندارد و اغلب مطالعات در این زمینه محدود به مدل‌سازی رفتار این سیستم‌ها می‌شود. در این مورد نیز داده‌های صنعتی یا آزمایشگاهی برای سنجش اعتبار مدل وجود ندارد. در صورت استفاده از نتایج این مدل در مدل‌سازی کامل تبدیل‌کننده‌ی خودگرمایی و مقایسه‌ی نتایج به‌دست آمده از این مدل با داده‌های صنعتی موجود، امکان سنجش اعتبار مدل وجود دارد.

۵- علائم و متغیرها

مکان مختصات x

دما T

کسر جرمی جزء Y_{gk}

فشار P



چهارمین کنفرانس مشعل و کوره‌های صنعتی

تهران، ۲۹ خرداد ۱۳۹۳ هجری: هم‌اندیشان انرژی‌های شیمیایی

www.Koureh.ir

تلفن تهران: ۸۸۶۷۱۶۷۶

سرعت مخلوط واکنش u

مشعل قطر d

دانسیته جرمی ρ

ویسکوزیته مخلوط μ

وزن مولکولی جزء $W_{g,k}$

وزن مولکولی مخلوط متوسط \bar{W}

گرمای ویژه مخلوط $c_{p,k}$

گرمای ویژه جزء $c_{p,g,k}$

انتالی ویژه جزء $h_{g,k}$

سرعت خالص تولید جزء $G_{g,k}$

شار نفوذ جرمی جزء $j_{g,k}$

مراجع

- [1] Rice, S. F., Mann D. P. (2007). Autothermal Reforming of Natural Gas to Synthesis Gas, Sandia National Laboratories
- [2] Brown, L. F. (2001). A comparative study of fuels for on-board hydrogen production for fuel-cell-powered automobiles. International Journal of Hydrogen Energy, 26, 381–397.
- [3] Zamaniyan, A., Behroozsarand, A., Ebrahimi, H. (2009). Analysis of secondary autothermal reformer using a thermodynamic POX model, World Academy of Science, Engineering and Technology, 49.
- [4] Liu, J. A. (January 3, 2006). Kinetics, catalysis and mechanism of methane steam reforming. Worcester polytechnic institute.
- [5] Halabi, M. H. (2008). Modeling and analysis of autothermal reforming of methane to hydrogen in a fixed bed reactor. Chemical Engineering Journal, 137, 568-578.
- [6] Wei-hsin Chen, M.-R. L.-J.-S. (2010). Thermodynamic analysis of hydrogen production from methane via autothermal reforming and partial oxidation followed by water gas shift. Hydrogen Energy, 35, 787-797.
- [7] Zahedi nezhad, M., Rowshanzamir, S. & Eikani, M. H. (2008). Autothermal reforming of methane to synthesis gas: Modeling and simulation. international journal of hydrogen energy, 1292-1300
- [8] Pina, J., Borio, D. O. (2006). Modeling and simulation of autothermal reformer, Latin American Applied Research, 36, 289-294



چهارمین کنفرانس مشعل و کوره‌های صنعتی

تهران، ۲۹ خرداد ۱۳۹۳ هجری: هم‌اندیشان انرژی کیمیا

www.Koureh.ir

تلفن تهران: ۸۸۶۷۱۶۷۶

[9] Amirshaghghi, H., Zamaniyan, A., Ebrahimi, H., Zarkesh, M. (2010). Numerical simulation of methane partial oxidation in the burner and combustion chamber of autothermal reformer, *Applied Mathematical Modelling*, 34, 2312–2322

[10] S. Gordon, B.J. McBride, Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks and Chapman-Jouguet Detonations, NASA Report SP-273, 1971.

[11] A. Burcat, *Combustion Chemistry*, Springer, 1984.

[12] Joseph F. Grcar, TWOPNT boundary value problem solver, Sandia National Laboratory, version 2.22B of March 1991

www.Koureh.ir