



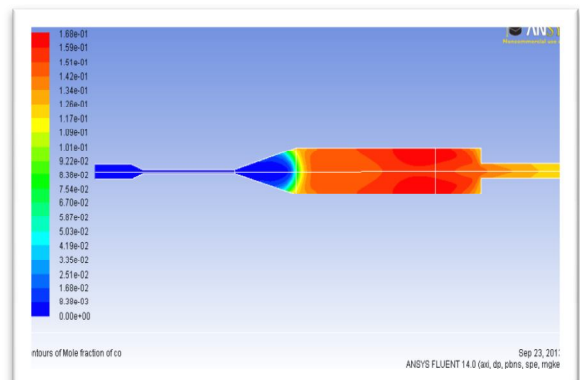
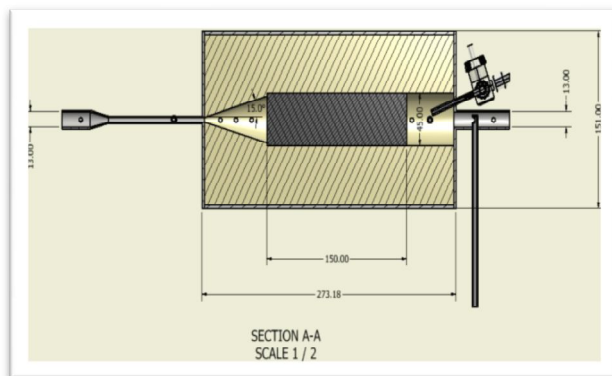
Διπλωματική εργασία
με θέμα

« Πειραματική μελέτη και αριθμητική προσομοίωση μερικής οξείδωσης μεθανίου
σε αναμορφωτή καυσίμου με wall flow filter »

Σπουδαστής

Μπενέκος Σωτήρης

A.M:02109722



Επιβλέπουσα: Φούντη Μαρία, Καθηγήτρια Ε.Μ.Π.



Πίνακας περιεχομένων	
Περίληψη.....	4
Ευχαριστίες.....	5
Κεφάλαιο 1 ^ο : Εισαγωγή.....	6
1.1 Τεχνολογία Υδρογόνου	6
1.2 Αναμόρφωση-Παραγωγή syngas	7
1.3 Φαινόμενο "superadiabatic" καύσης σε πορώδες μέσο (Inert Porous media) IPM και αναμορφωτής T-POX.....	8
Κεφάλαιο 2 ^ο : Αρχές καύσης σε IPM.....	9
2.1 Διάδοση και σταθεροποίηση της φλόγας σε αδρανή πορώδη μέσα IPM.....	9
2.1.2 Σταθεροποίηση σε σταθερή καύση.....	12
2.1.3 Επίδραση διάχυσης μάζας στην σταθεροποίηση της φλόγας.....	14
2.2 Σημαντικοί παράμετροι παραγωγής υδρογόνου από T-POX διεργασία μεθανίου.....	15
2.2.1 Ισορροπία και χημικά φαινόμενα σε μερική οξείδωση.....	15
2.2.2 Μελέτες αναμόρφωσης σε TPOX μεθανίου για Θερμική φόρτιση/Προθέρμανση/Soot point	16
2.3 Αναγέννηση της αιθάλης	18
2.3.1 Επίδραση του λόγου ισοδυναμίας αέρα στην αναγέννηση	22
2.3.2 Επίδραση προθέρμανσης αέρα στην αναγέννηση	22
2.4 Περιληπτικά οι στόχοι της εργασίας	23
Κεφάλαιο 3 ^ο : Ανάπτυξη αριθμητικού μοντέλου του T-POX αναμορφωτή.....	24
3.1 Η 2D γεωμετρία του αναμορφωτή	24
3.2 Πλέγμα και ανεξαρτησία λύσης.....	26
3.3 Αριθμητικές προσομοιώσεις της πρώτης προκαταρκτικής γεωμετρίας για δέσμη αέρα.....	33
3.3.1 Παραμετροποίηση του πεδίου ροής στο πορώδες μέσο.....	35
3.4 Προσομοίωση του soot trap ως porous packed bed χρησιμοποιώντας το μοντέλο των Konstandopoulos-Johnson	38
3.4.1 Μοντέλο των Konstandopoulos-Johnson	38
3.4.2 Προσομοίωση του soot trap ως porous packed bed στο ANSYS.....	39
Κεφάλαιο 4 ^ο : Πειραματική διερεύνηση πρότυπου αναμορφωτή καυσίμου	46
4.1 T-POX αναμορφωτής βασισμένος σε wall flow filter	46
4.1.1 Το σχέδιο και η κατασκευή του T-POX αναμορφωτή.....	46
4.2 Η πειραματική διάταξη.....	52
4.2.1 Μετρήσεις αιθάλης	53
4.3 Το σύστημα αραιώσης του δείγματος.....	54



4.4 Πειραματική διαδικασία και οι διερευνηθείσες περιπτώσεις.....	55
4.5 Πειραματικά αποτελέσματα.....	57
4.5.1 Διερεύνηση εύρους λειτουργίας.....	57
4.5.2 Θερμοκρασιακά προφίλ και χημικά είδη.....	58
4.5.3 Απόδοση αναμόρφωσης/αναγέννηση αιθάλης / κατανομές αιθάλης.....	67
Κεφάλαιο 5 ^ο : Προσομοίωση χημικής κινητικής στον Αναμορφωτή.....	74
5.1 Προσομοίωση χημικής κινητικής μερικής οξειδωσης μεθανίου χρησιμοποιώντας ένα GRI μηχανισμό 19 χημικών ειδών.....	74
5.1.1 Σχετικά με την σύγκλιση των προσομοιώσεων.....	75
5.1.2 Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης και σύγκριση με τα πειραματικά.....	75
Κεφάλαιο 6 ^ο : Περίληψη, παρατηρήσεις και συμπεράσματα.....	94
Αναφορές.....	97
Παραρτήματα.....	100



Περίληψη

Η παρούσα διπλωματική εργασία πραγματοποιήθηκε στο πλαίσιο του προγράμματος ανταλλαγής ξένων φοιτητών, σε συνεργασία μεταξύ του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου (Εργαστήριο Ετερογενών μιγμάτων και συστημάτων καύσης) (Καθ.Μ.Φουντη) και του Technical University Bergakademie Freiberg (Chair for Gas and Heat Technology) (Prof.D.Trimis).

Πειραματική καθώς και αριθμητική διερεύνηση διενεργήθηκε για διεργασία θερμικής μερικής οξειδωσης μεθανίου, σε αναμορφωτή καυσίμου βασισμένο σε wall flow filter ή όποιος διαφορετικά καλείται soot trap (παγίδα αιθάλης.). Στο πειραματικό κομμάτι το οποίο διεξήχθη στο TU Freiberg, αξιολογήθηκαν τα χαρακτηριστικά της διαδικασίας αναμόρφωσης σε πρότυπο αναμορφωτή καυσίμου, με χρήση κεραμικού μέσου όπως είναι το soot trap και επιπλέον η κατακράτηση και αναγέννηση της αιθάλης μέσα στην ίδια γεωμετρία του αναμορφωτή. Επίσης αξιολογήθηκε η αποδοτικότητα του αναμορφωτή, ενώ ακόμα μετρήθηκαν οι κατανομές σωματιδίων αιθάλης μέσω του Scanning Mobility Particle Sizer (SMPS) και η περιεκτικότητα των χημικών ειδών των καυσαερίων.

Όσον αφορά το κομμάτι της αριθμητικής προσομοίωσης, εκπονήθηκε ένα απλοποιημένο μοντέλο του αναμορφωτή θερμικής οξειδωσης ή όπως θα καλείται στο εξής T-POX (Thermal Partial Oxidation) αναμορφωτής, σε εμπορικό κώδικα CFD (Computational Fluid Dynamics) ANSYS-Fluent, περιλαμβάνοντας την προσομοίωση χημικής κινητικής της μερικής οξειδωσης του μεθανίου. Γι' αυτό το σκοπό ένα μειωμένος χημικός μηχανισμός αντιδράσεων εισήχθη και προσομοιώθηκε για διάφορες περιπτώσεις από άποψη θερμικής ισχύος και λόγους ισοδυναμίας αέρα. Επίσης ένα μοντέλο πρόβλεψης της πτώσης πίεσης στο soot trap των Konstandopoulos-Johnson χρησιμοποιήθηκε στην προσομοίωση. Τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με τα πειραματικά.

Στο πειραματικό κομμάτι καθώς και στην αριθμητική προσομοίωση η θερμική ισχύς στην οποία έγινε η μεγαλύτερη διερεύνηση ήταν για 1,5 kW δεδομένου ότι η κατασκευή του αναμορφωτή ήταν μικρών διαστάσεων. Τα πειραματικά αποτελέσματα έδειξαν ότι η αποδοτικότητα έφτασε το 47% για λόγο ισοδυναμίας αέρα 0,5 και το 56% κατά την διάρκεια αναγέννησης της αιθάλης για λόγο ισοδυναμίας αέρα 0,6. Η εμφάνιση της αιθάλης (soot point) εντοπίστηκε για λόγο ισοδυναμίας αέρα 0,42. Η αποδοτικότητα του αναμορφωτή είναι αξιοσημείωτη και θα μπορούσε να αυξηθεί περισσότερο αν λειτουργούσε σε υψηλότερη θερμική ισχύ σε συνδυασμό με έναν βελτιστοποιημένο σχεδιασμό. Αυτό ίσως οδηγούσε σε χαμηλότερους λόγους ισοδυναμίας εμφάνισης της αιθάλης, αυξάνοντας την αποδοτικότητα και καθιστώντας αυτόν τον αναμορφωτή ανταγωνιστικό.

Η πειραματική προσομοίωση έδειξε ότι είναι δυνατή προσομοίωση της πτώση πίεσης του soot trap εάν αυτό προσομοιωθεί στο ANSYS ως porous packed bed το οποίο θα λαμβάνει υπόψη τα πραγματικά χαρακτηριστικά του soot trap. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης της χημικής κινητικής συγκρίθηκαν με τα πειραματικά και φάνηκε να συμφωνούν αρκετά με εξαίρεση την περίπτωση της συγκέντρωσης του μεθανίου όπου φάνηκε να υπερεκτιμάτε για λόγους που μπορούν να εξηγηθούν.



Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τους επιβλέποντες καθηγητές κα. Φούντη Μαρία και κ. Δημοσθένη Τρίμη στην Ελλάδα και την Γερμανία αντίστοιχα για την εμπιστοσύνη που μου έδειξαν στην ανάθεση του θέματος καθώς και σε όλων των ειδών πολύτιμη υποστήριξη που μου παρείχαν. Επίσης ευχαριστώ πολύ τον κ. Σκεύη Γιώργο για την υποστήριξη σε θέματα γνώσεων και καθοδήγησης καθ' όλη την διάρκεια αυτής της διπλωματικής εργασίας. Ένα πολύ μεγάλο ευχαριστώ στην κα. Λούκου Αλεξάνδρα και την κα. Isabel Frenzel για την πολύτιμη υποστήριξη τους σε θέματα γνώσεων και κυρίως στο σχεδιασμό, κατασκευή και διεκπεραίωση των πειραμάτων. Ευχαριστώ ακόμα την κα. Λούκου Αλεξάνδρα για την καθοδήγηση, τις συμβουλές και παρατηρήσεις για την τελική εργασία. Επίσης ευχαριστώ τους διαχειριστές του δικτύου του TU Freiberg Mr. Freitag Jürgen και Mr. Degenkolb Christian χωρίς την βοήθεια των οποίων δεν θα πραγματοποιούνταν το υπολογιστικό κομμάτι αυτής της διπλωματικής εργασίας. Τέλος ευχαριστώ πολύ το προσωπικό του μηχανουργείου για την άμεση ανταπόκριση σε θέματα κατασκευής που μας επέτρεψε να κερδίσουμε πολύτιμο χρόνο για την εκπόνηση των πειραμάτων.



Κεφάλαιο 1^ο: Εισαγωγή

1.1 Τεχνολογία Υδρογόνου

Η παρούσα διπλωματική εργασία σχετίζεται με την διερεύνηση ορισμένων θεμάτων, που αναφέρονται στον τομέα τεχνολογίας του υδρογόνου. Τα τελευταία χρόνια υπάρχει μία αύξηση του ενδιαφέροντος για την ανάπτυξη αυτής της τεχνολογίας, καθώς το υδρογόνο για αρκετούς λόγους θεωρείται το καύσιμο του μέλλοντος. Περιέχει περισσότερη ενέργεια ανά μονάδα μάζας σε σχέση με οποιοδήποτε άλλο καύσιμο, όταν καίγεται έχει ελάχιστες εκπομπές, ενώ κατά την ηλεκτροχημική του μετατροπή σε H_2O μέσα σε μία κυψέλη καυσίμου, οι εκπομπές του είναι μηδενικές. Δυστυχώς το H_2 δεν είναι εύκολα προσιτό εξαιτίας της καθαρής μορφής του, και ως εκ τούτου το παράγουμε από μοριακές ενώσεις που το περιέχουν, όπως το H_2O και υδρογονάνθρακες. Η αναμόρφωση υδρογονανθράκων (κυρίως ορυκτών καυσίμων) είναι η πιο κοινή διεργασία παραγωγής H_2 . Για την αναμόρφωση απαιτείται η χρήση ενός αναμορφωτή καυσίμου (**Fuel Reformer**) για τον οποίο θα γίνει λόγος στην συνέχεια. Η αναμόρφωση υδρογονανθράκων πλεονεκτεί έναντι άλλων διεργασιών καθώς για την παραγωγή υδρογόνου, χρησιμοποιεί τα ορυκτά καύσιμα στα οποία βασίζεται η σημερινή οικονομία με ήδη αναπτυγμένες υποδομές. Ως εκ τούτου μπορούμε να επιτύχουμε μία ομαλή μετάβαση σε μία οικονομία βασισμένη στο υδρογόνο που μπορεί ανταποκριθεί στην πραγματική ζήτηση ενέργειας. Επίσης τα ήδη υπαρκτά ορυκτά καύσιμα μπορούν να χρησιμοποιηθούν και να μας προσφέρουν ενέργεια πιο αποδοτικά και με λιγότερες εκπομπές.

Στις αναπτυχθείσες νεωτεριστικές τεχνολογίες βασισμένες στο H_2 για την παραγωγή ενέργειας, είναι κάποιες ειδικές κατηγορίες κυψελών υδρογόνου υψηλών θερμοκρασιών HTFCs (High Temperature Fuel Cells), τα SOFCs (Solid Oxide Fuel Cells) και τα MCFCs (Molten Carbonate Fuel Cells) τα οποία έχουν ευελιξία ως προς το είδος του καυσίμου που μπορεί να χρησιμοποιήσουν. Μπορούν να λειτουργήσουν με υδρογονάνθρακες ή αναμορφωμένους υδρογονάνθρακες ως καύσιμο. Η λειτουργία των SOFCs απευθείας με καύσιμο υδρογονανθράκων είναι υπό διερεύνηση και προς το παρόν για μικρές διατάξεις σε εργαστηριακό επίπεδο, για μεγαλύτερες όμως διατάξεις απαιτείται αναμόρφωση του καυσίμου. Εξαιτίας των σχετικά υψηλών θερμοκρασιών και της αύξησης του κινδύνου των επικαθίσεων άνθρακα στην άνοδο της κυψέλης, η εξωτερική αναμόρφωση προτιμάται έναντι της εσωτερικής. Με την αναμόρφωση μπορούμε να πάρουμε H_2 και CO . Το μίγμα που αποτελείται κυρίως από H_2 και CO ονομάζεται "synthesis gas" ή "syngas". Μπορεί να παραχθεί από υδρογονάνθρακες (υγρούς όπως πχ. heating oil, gasoline, diesel – αέριους όπως πχ. natural gas, LPG) μέσω διεργασιών αναμόρφωσης τους και να χρησιμοποιηθεί απευθείας σε αυτές τις κυψέλες καυσίμου για την παραγωγή απευθείας ηλεκτρικής ενέργειας σε συνδυασμένα συστήματα συμπαραγωγής θερμότητας και ισχύος CHP (Combined Heat and Power systems). Τα CHP συστήματα είναι αρκετά υποσχόμενα για βιομηχανικές και δομικές εφαρμογές. Η χρήση των SOFCs επίσης πιθανολογείται σε υβριδικά συστήματα υψηλών πιέσεων λειτουργίας, όπου η απόδοση μπορεί να ξεπεράσει το 70% με τον συνδυασμό SOFC-gas-turbine. Επομένως τα SOFCs είναι ιδιαίτερα ελκυστικά συγκριτικά με τα συμβατικά συστήματα ενέργειας γιατί παρουσιάζουν μεγάλη αποδοτικότητα και μειωμένες εκπομπές ρύπων. Έχουν την δυνατότητα πολύ υψηλών αποδόσεων σε υψηλές θερμοκρασίες (600°C-1000°C). Επίσης ένα ακόμα πλεονέκτημα που έχουν σε σύγκριση με άλλες κυψέλες καυσίμου



είναι ότι μας προσφέρουν ένα εύρωστο σύστημα παραγωγής ενέργειας από την άποψη ότι μπορούν να δουλέψουν ανάμεσα σε ένα μεγάλο εύρος θερμοκρασιών, καθώς επίσης και σε ένα μεγάλο εύρος σύστασης syngas.

1.2 Αναμόρφωση-Παραγωγή syngas

Το ενδιαφέρον λοιπόν επικεντρώνεται στους τρόπους με τους οποίους μπορεί να παραχθεί syngas (κυρίως H_2, CO) το οποίο είναι απαραίτητο για την τροφοδότηση των SOFCs. Αυτό μπορεί να γίνει όπως έχουμε ήδη αναφέρει μέσω διαδικασιών αναμόρφωσης ορυκτών καυσίμων ή ακόμα και βιομάζας. Είναι απαραίτητη η ενσωμάτωση στο σύστημα ενός αναμορφωτή καυσίμου (fuel reformer) στον οποίο γίνεται η μετατροπή του υδρογόνανθρακα σε syngas. Αν και υπάρχουν πολυάριθμες τεχνολογίες για την παραγωγή υδρογόνου, τρεις είναι οι κύριες επικρατούσες:

- Steam Reforming (SR)
- Autothermal reforming (ATR)
- Partial Oxidation (POX) δηλαδή μερική οξείδωση, που σημαίνει καύση με πλούσιο μίγμα (rich combustion) άρα λόγοι αέρα-καύσης (λ) μικρότερη τις μονάδας.

Σύγκριση διεργασιών αναμόρφωσης

Οι μέθοδοι partial oxidation και autothermal reforming έχουν καλύτερες δυναμικές αποκρίσεις και πιο συμπαγή διάταξη συγκριτικά με την μέθοδο του steam reforming. Η εξώθερμη αναμόρφωση του POX δείχνει να πλεονεκτεί από την άποψη της πολυπλοκότητας και ενσωμάτωσης, ενώ δεν χρειάζεται κάποια εξωτερική πηγή θερμότητας ή εξισορρόπηση νερού. Ωστόσο χαρακτηρίζεται από την σχετικά χαμηλή απόδοση στην παραγωγή υδρογόνου συγκριτικά με της διεργασίες SR ή ATR.

Με σκοπό να βελτιωθεί η παραγωγή υδρογόνου, οι POX reformers λειτουργούν συνήθως σε χαμηλούς λόγους αέρα καύσης (λ), όπου όμως τότε ευνοείται η παραγωγή αιθάλης (soot), εξαιτίας των χαμηλών θερμοκρασιών που επικρατούν σε χαμηλά λ , ενώ οδηγούμαστε και στην μείωση του συνολικού ρυθμού αντίδρασης.

Προς βελτίωση του συνολικού ρυθμού αντίδρασης ενσωματώνεται στον POX reformer καταλύτης και έτσι έχουμε τον C-POX (Catalytic) στον οποίο δεν παράγεται αιθάλη παρ ότι έχουμε χαμηλούς λόγους αέρα-καύσης (λ).

Ωστόσο οι καταλύτες είναι ευαίσθητοι στον να “δηλητηριαστούν” (poisoning) από τις επικαθίσεις άνθρακα με αποτέλεσμα την σταδιακή απενεργοποίησή τους (deactivation problem), παθαίνουν εύκολα ζημιά για θερμοκρασίες άνω των $1000^\circ C$ ενώ δείχνουν μία τάση να εκφυλίζονται με τον καιρό.



1.3 Φαινόμενο "superadiabatic" καύσης σε πορώδες μέσο (Inert Porous media) IPM και αναμορφωτής T-POX

Μια δεύτερη πολλά υποσχόμενη εναλλακτική πρόταση για την αύξηση του συνολικού ρυθμού αντίδρασης, την αύξηση σταθερότητας της φλόγας και την αντιμετώπιση των χαμηλών αδιαβατικών θερμοκρασιών, είναι με την ανάκτηση της εσωτερικής θερμότητας της αντίδρασης που επιτυγχάνεται με την ενσωμάτωση εσωτερικά του αναμορφωτή ενός αδρανούς πορώδους υλικού (Inert Porous Media) IPM. Αυτός είναι ένας **T-POX reformer** (Thermal-Partial Oxidation).

Με την καύση μέσα στο πορώδες μέσο εκμεταλλευόμαστε το φαινόμενο της υπέρβασης ενθαλπίας καύσης "excess enthalpy combustion" και συμβαίνει ως εξής:

Η καύση σε ένα σταθερό πορώδες μέσο (porous media) εμφανίζεται μέσα στα κενά της πορώδους μήτρας (porous matrix). Η ενέργεια μεταφέρεται στο στερεό υλικό της μήτρας με συναγωγή από τα καυτά αέρια. Το πορώδες μέσο έχει υψηλότερη θερμική αγωγιμότητα από το αέριο μίγμα και επιπλέον ακτινοβολεί σε μεγάλο βαθμό. Διά ακτινοβολίας και αγωγής τελικά κατανέμει αυτή την ενέργεια σε μία περιοχή ανάντη της φλόγας. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την μετάδοση ενέργειας στα αντιδρώντα κατά την είσοδό τους. Τελικά δηλαδή η πορώδης μήτρα λειτουργεί ως ένα είδος αναπόσπαστου προθερμαντή. Αυτή η προθέρμανση οδηγεί σε υψηλότερες θερμοκρασίες καύσης και αυξάνει την σταθερότητα συγκριτικά με μία ελεύθερη στρωτή φλόγα προανάμιξης. Επίσης στην ζώνη της φλόγας είναι πιθανό να έχουμε και *θερμοκρασίες υψηλότερες της αδιαβατικής θερμοκρασίας φλόγας* που μπορεί να υπολογιστεί θεωρητικά για το μίγμα. Έτσι σε αυτή την τεχνολογία καύσης δίνεται το όνομα "superadiabatic". Αυτό το φαινόμενο υψηλής ανακυκλοφορίας θερμότητας μέσα στην πορώδη μήτρα, αυξάνει τελικά την ταχύτητα καύσης, την σταθερότητα φλόγας ενώ η ταχύτητας της φλόγας μπορεί να είναι 10 έως και 30 φορές υψηλότερη από την ταχύτητα στρωτής φλόγας. Συνεπώς τα λειτουργικά χαρακτηριστικά της T-POX διεργασίας αυξάνονται με την χρήση πορώδους μέσου ή αλλιώς IPM (Inert Porous Media).

Αναφορικά, με βάση αυτό το φαινόμενο κατά τα τελευταία χρόνια έχουν αναπτυχθεί καυστήρες ακτινοβολίας με πορώδες μέσο, με την ονομασία PRBs (Porous Radiant Burners) οι οποίοι χρησιμοποιούνται ευρέως εξαιτίας των σημαντικών πλεονεκτημάτων που παρουσιάζουν έναντι των συμβατικών καυστήρων.

Κεφάλαιο 2^ο: Αρχές καύσης σε IPM

2.1 Διάδοση και σταθεροποίηση της φλόγας σε αδρανή πορώδη μέσα IPM

Πρόκειται για ένα φαινόμενο μεταφοράς, όπου η διάχυση μάζας και θερμότητας λαμβάνουν χώρα σε σημαντικό βαθμό. Γι' αυτό γίνεται η χρήση των αδιάστατων αριθμών Peclet και Lewis η οποίοι γενικά ορίζονται ως εξής:

$$\text{Peclet} = \frac{\text{flow}}{\text{diffusion}} \begin{cases} \text{for heat } Pe = \frac{LU}{a} = Re \cdot Pr & \{\text{Εξ.2.1}\} \\ \text{for mass } Pe = \frac{LU}{D} = Re \cdot Sc & \{\text{Εξ.2.2}\} \end{cases}$$

Re: αδιάστατος αριθμός Reynolds

Sc: αδιάστατος αριθμός Schmidt

L: χαρακτηριστικό μήκος [m]

U: ταχύτητα ροής [m/s]

D: διαχυτότητα μάζας (mass diffusivity) [m^2/s]

a: θερμική διαχυτότητα (thermal diffusivity) [m^2/s]

$$\alpha = \frac{K}{\rho c_p} \quad \{\text{Εξ.2.3}\}$$

K: θερμική αγωγιμότητα [W/mK]

ρ : πυκνότητα [Kg/m^3]

c_p : συντελεστής θερμοχωρητικότητας [J/KgK]

$$\text{Lewis} = \frac{\text{thermal diffusivity}}{\text{mass diffusivity}} = \frac{a}{D} = \frac{Sc}{Pr} \quad \{\text{Εξ.2.4}\}$$

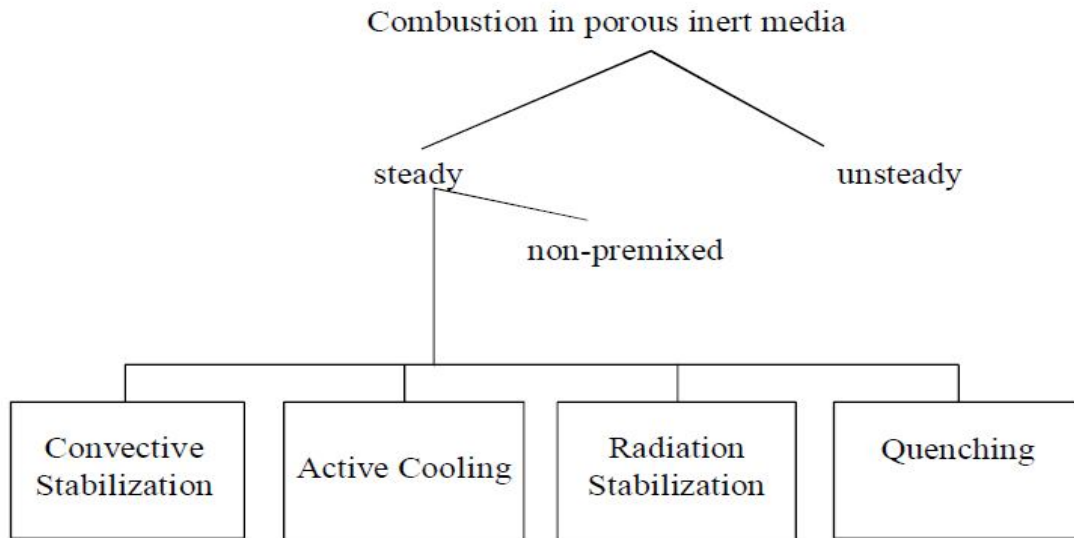
Πειράματα διάδοσης φλόγας έχουν διενεργηθεί σε πορώδες μέσο για μίγματα με διαφορετικό αριθμό Lewis, με σκοπό να καθοριστεί η τιμή του κρίσιμου αριθμού Peclet, πάνω από τον οποίο η διάδοση της φλόγας είναι δυνατή. Η διάδοση φλόγας σε αδρανές πορώδες μέσο εξαρτάται από την δομή και τις φυσικές ιδιότητες της μήτρας καθώς και από τις ιδιότητες του αερίου καυσίμου. Τα αποτελέσματα με βάση τον τρόπο διάδοσης της φλόγας μπορούν να κατηγοριοποιηθούν σε διαφορετικές ομάδες με τις πιο κύριες παραμέτρους τους να φαίνονται στον παρακάτω σχήμα 2.1.

Regime	Speed of combustion wave m/s	Mechanism of flame propagation
Low velocity (<i>LVR</i>)	$0 - 10^{-4}$	Heat conduction and inter-phase heat exchange
High velocity (<i>HVR</i>)	$0.1 - 10$	High convection
Rapid combustion (<i>RCR</i>)	$10 - 100$	Convection, low pressure gradient
Sound velocity (<i>SVR</i>)	$100 - 300$	Convection with significant pressure gradient
Low velocity detonation (<i>LVD</i>)	$500 - 1000$	Self ignition with shock wave
Normal detonation (<i>ND</i>)	$1500 - 2000$	Detonation with momentum and heat loss

Σχ. 2.1: Κατηγορίες διάδοσης φλόγας σε πορώδες μέσο[5]

2.1.1 Επίδραση της μεταφοράς θερμότητας

Μεταφορά θερμότητας σε πορώδες μέσο. Η σταθεροποίηση της φλόγας σε πορώδες αδρανές μέσο είναι σημαντικά διαφορετική σε σχέση με τις ελεύθερες φλόγες. Η σταθεροποίηση εξαρτάται κυρίως από τις ιδιότητες μεταφοράς θερμότητας της πορώδους μήτρας. Η μεταφορά θερμότητας εσωτερικά του πορώδους μέσου συνήθως περιγράφεται από μία μεταφορά θερμότητας στην οποία περιλαμβάνεται η ακτινοβολία, η μεταβίβαση θερμότητας των δύο φάσεων στερεάς και αέριας, καθώς επίσης η συναγωγή του αερίου και οι μηχανισμοί διασποράς (dispersive)[5]. Η επίδραση της μεταφοράς θερμότητας μέσα σε πορώδες μέσο είναι 2 με 3 τάξεις μεγέθους υψηλότερη συγκριτικά με τις ελεύθερες φλόγες και μπορεί να θεωρηθεί η κυρίαρχη παράμετρος για την διάδοση της φλόγας στις περισσότερες περιπτώσεις. Συγκριτικά με τις ελεύθερες φλόγες, η υψηλότερη μεταφορά θερμότητας οδηγεί σε πιο γρήγορη διάδοση της φλόγας, η οποία παρεμποδίζει την σταθεροποίησή της μέσα στο πορώδες μέσο. Για την λύση της σταθεροποίησης της φλόγας σε πορώδες μέσο, έχουν αναπτυχθεί διάφορες προσεγγίσεις που φαίνονται στο σχήμα 2.2.



Σχ. 2.2: Τεχνικές σταθεροποίησης φλόγας σε IPM[5]

Στις πιο συνηθισμένες περιπτώσεις καύσης LVR και HVR (πινακάκι) σε πορώδες μέσο, η διάδοση ή η εξάλειψη της φλόγας μπορεί να περιγραφεί από ένα τροποποιημένο αριθμό Peclet ο οποίος ορίζεται ως εξής:

$$Pe = \frac{S_L \cdot d_{p,eff} \cdot \rho_f \cdot C_{p,f}}{\lambda_f} = \frac{S_L \cdot d_p}{a_f} \quad \{\text{Εξ.2.5}\}$$

S_L : ταχύτητα στρωτής φλόγας [m/s]

$d_{p,eff}$: αποτελεσματική διάμετρος πόρου [m]

ρ_f : πυκνότητα ρευστού [Kg/m³]

$C_{p,f}$: συντελεστής θερμοχωρητικότητας ρευστού [J/KgK]

λ_f : συντελεστής αγωγιμότητας ρευστού [W/mK]

a_f : θερμική διαχυτότητα ρευστού [m²/s]

Δείκτες

L: στρωτή (Laminar)

p: πορώδες (pore)

eff: αποτελεσματική (effective)

f: ρευστό (fluid)

Δηλαδή ο αριθμός Pe τροποποιήθηκε βάζοντας την ταχύτητα της στρωτής φλόγας S_L αντί της ταχύτητας της ροής U και περιγράφει την αναλογία μεταξύ της θερμότητας που απελευθερώνεται λόγω της καύσης μέσα σε ένα πόρο και της θερμότητας που απορροφούν τα τοιχώματα του. Αυτή η αναλογία θα πρέπει να υπερβαίνει μία κρίσιμη τιμή για να έχουμε σταθεροποίηση της φλόγας σε ένα κρύο πορώδες μέσο, η οποία δίνεται 65 ± 45 . Η διάδοση της

φλόγας σε αυτή την περίπτωση κυριαρχείται από την συναγωγή αλλά επίσης και από την υψηλή αγωγιμότητα και της ιδιότητες ακτινοβολίας της πορώδους μήτρας που επιδρούν στην ταχύτητα της φλόγας. Επιπλέον παράμετροι στον αριθμό Pe είναι η αποτελεσματική διάμετρος του πόρου $d_{p,eff}$ και η θερμική διαχυτότητα του ρευστού α_f . Η $d_{p,eff}$ εκφράζει ένα ισοδύναμο μήκος κλίμακας για τη μεταφορά θερμότητας. Έχοντας την δυνατότητα επιλογής αυτής παραμέτρου, μπορούμε να καθορίσουμε αν θα έχουμε σταθεροποίηση ή όχι της φλόγας, επιλέγοντας την κατάλληλη διάμετρο του πόρου της πορώδους μήτρας. Επομένως, θα υπάρξει μία κρίσιμη διάμετρος πόρου πάνω από την οποία θα έχουμε διάδοση της φλόγας και κάτω από αυτή απόσβεση (quenching) της φλόγας. Παρ' όλα αυτά, η διάδοση της φλόγας μπορεί να είναι εφικτή και σε υποκρίσιμα πορώδη, εάν η θερμοκρασία της πορώδους μήτρας είναι αρκετά υψηλή, οπότε οι αντιδράσεις δεν αποσβένονται από χαμηλές θερμοκρασίες του τοιχώματος. Αυτό το είδος λειτουργίας συχνά ονομάζεται "filtration combustion".

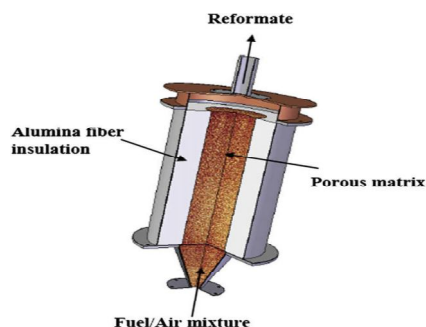
2.1.2 Σταθεροποίηση σε σταθερή καύση

Σε ένα υπερκρίσιμο πορώδες μέσο οι μηχανισμοί που ενεργούν είναι οι ίδιοι όπως στις ελεύθερες φλόγες, μόνο που οι μεταφορά θερμότητας γίνεται πιο σημαντική. Η αποτελεσματική αγωγή θερμότητας καθώς και η θερμική διαχυτότητα είναι 2-3 φορές τάξεις μεγέθους υψηλότερες από τις αντίστοιχες ενός αερίου. Σύμφωνα με μία απλοποιημένη θεωρία διάδοσης φλόγας προκύπτει ότι η ταχύτητα φλόγας S είναι ανάλογη της τετραγωνικής ρίζας της θερμικής διαχυτότητας α_f .

$$S = \sqrt{\frac{\alpha_f}{\tau}} \quad \{\text{Εξ.2.6}\}$$

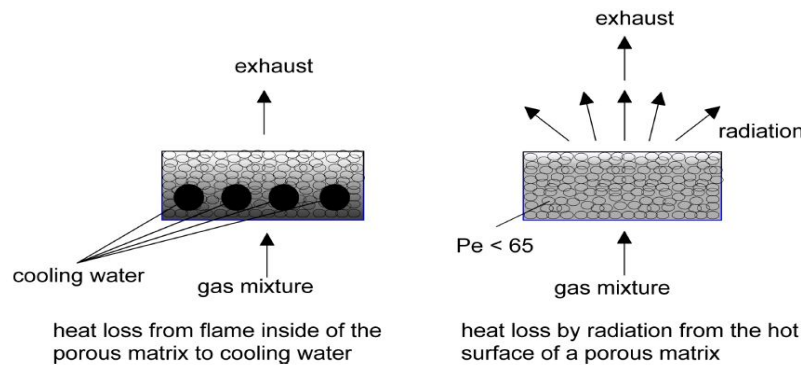
τ : η χαρακτηριστική χρονική κλίμακα της αντίδρασης

Από αυτό προκύπτει ότι η ταχύτητα φλόγας σε υπερκρίσιμα πορώδη είναι 10-30 φορές υψηλότερη από μίας ελεύθερης στρωτής φλόγας. Μία δυνατότητα για την σταθεροποίηση της φλόγας θα ήταν να προκαλέσουμε την αλλαγή της ταχύτητας της ροής σταδιακά ή συνεχόμενα με την μεταβολή της διατομής του πεδίου ροής όπως φαίνεται στο σχήμα 2.3. Για μίγμα μεθανίου-αέρα σε πορώδες μέσο απαιτείται ταχύτητα ροής σε ένα εύρος 2-5[m/s] για την αποφυγή flashback. Αυτές οι ταχύτητες είναι περίπου δέκα φορές υψηλότερες συγκριτικά με των ελεύθερων φλογών. [5]



Σχ. 2.3: Ένας TPOX αναμορφωτής [3] όπου η σταθεροποίηση της φλόγας επιτυγχάνεται από την βαθμιαία αλλαγή της διατομής του κωνικού τμήματος.

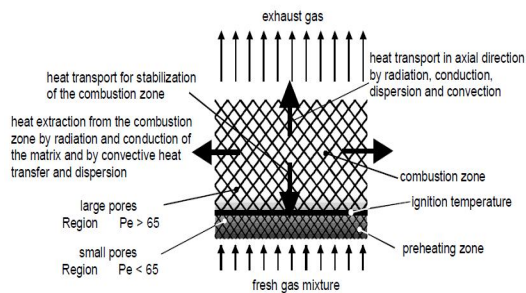
Μία άλλη δυνατότητα σταθεροποίησης της φλόγας είναι με την ψύξη της ζώνης αντίδρασης, προσαρμόζοντας για παράδειγμα σωλήνες νερού. Επίσης μπορεί να έχουμε ψύξη και μόνο με την έντονη ακτινοβολία της ζώνης αντίδρασης. Το πορώδες παίρνει την θερμότητα της φλόγας και την διαχέει δια ακτινοβολίας στο περιβάλλον. Η αποτελεσματική μετάδοση θερμότητας δια ακτινοβολίας εμφανίζεται για υψηλές θερμοκρασίες πάνω από τα όρια ανάφλεξης. Αυτό σημαίνει ότι στους δια ακτινοβολίας ψυχομένους καυστήρες, η πορώδης μήτρα πρέπει να είναι υποκρίσιμη, επειδή διαφορετικά η φλόγα θα μπορούσε να μετακινηθεί στην πορώδη μήτρα με αποτέλεσμα τελικά να οδηγηθούμε σε flashback.



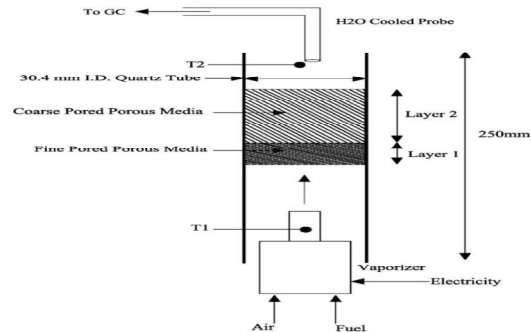
Σχ. 2.4: Σταθεροποίηση της φλόγας σε πορώδες μέσο με ψύξη[5]

Μία άλλη δυνατότητα για την σταθεροποίηση της φλόγας με χρήση της τεχνικής θερμικής απόσβεσης της φλόγας (thermal flame quenching) όπου μία διάταξη αυτού του είδους φαίνεται στο σχήματα 2.5, 2.6. Δηλαδή ένας συνδυασμός πορώδους χωρισμένο σε δύο περιοχές με διαφορετικές διαμέτρους πόρου όπου έχουμε υποκρίσιμο και υπερκρίσιμο αριθμό Peclet αντίστοιχα, με κρίσιμο να θεωρείται $Pe=65$.

Στην πρώτη περιοχή όπου έχουμε την ροή του κρύου αέριου μίγματος, η καύση είναι αδύνατη καθώς έχουμε υποκρίσιμο αριθμό Peclet επομένως η καύση εμφανίζεται στην υπερκρίσιμη δεύτερη περιοχή με το μεγαλύτερο πορώδες. Επομένως η φλόγα σταθεροποιείται στην διεπαφή των δύο περιοχών. Αυτός ο τρόπος δίνει την δυνατότητα σταθεροποίησης της φλόγας στην ίδια θέση για ένα μεγάλο εύρος ταχυτήτων ροής. Με σκοπό την αποφυγή flashback το ποσό θερμότητας που μεταφέρεται αντίθετα της κατεύθυνσης της ροής δεν θα πρέπει να είναι μεγαλύτερο του ποσού θερμότητας που μπορεί να απορροφήσει το φρέσκο εισερχόμενο μίγμα γιατί διαφορετικά θα δημιουργηθεί ένα κύμα καύσης ξεκινώντας από την θερμή περιοχή της διεπαφής το οποίο μπορεί πιθανόν να ταξιδέψει αντίθετα της ροής. Αυτό μπορεί να αντιμετωπιστεί με την περιοχή A να έχει μικρή αγωγή ώστε να μην μεταφέρεται μεγάλη ποσότητα θερμότητας. Αντίθετα η δεύτερη περιοχή είναι καλό να χαρακτηρίζεται από υψηλή αγωγή θερμότητας επειδή επιτρέπει την λειτουργία σε υψηλές ταχύτητες ροής χωρίς κίνδυνο blow-off. Τυπικά, για σταθερή λειτουργία είναι εφικτές οι θερμικές φορτίσεις της τάξης 3000 kW/m^2 και στιγμιαίες μέγιστες μεγαλύτερες 4500 kW/m^2 .



Σχ.2.5: Heat transport and flame stabilization in a two-layer porous burner [5]



Σχ.2.6: Heat transport and flame stabilization in a two layer porous burner [9]

2.1.3 Επίδραση διάχυσης μάζας στην σταθεροποίηση της φλόγας

Για την σταθεροποίηση της φλόγας όπως ήδη αναλύθηκε υπάρχουν τρόποι που βασίζονται στον αριθμό Peclet. Παρ' όλα αυτά σε αυτή περίπτωση έχει αμεληθεί η επίδραση της διάχυσης μάζας. Σε ορισμένες περιπτώσεις γι' αυτό το λόγο παρατηρείται αστάθεια της φλόγας παρ' ότι έχει γίνει σχεδιασμός με βάση τον αριθμό Peclet. Η διάχυση της μάζας εκφράζεται από τον αδιάστατο αριθμό Lewis για ένα συστατικό. Εκφράζει το λόγο μεταξύ της μεταφοράς θερμότητας και της διάχυσης μάζας και είναι:

$$Le_c = \frac{\lambda_f}{D_c \cdot \rho_f \cdot C_{p,f}} = \frac{a_f}{D_c} \quad \text{Εξ. \{2.7\}}$$

ρ_f : πυκνότητα ρευστού [Kg/m³]

$C_{p,f}$: συντελεστής θερμοχωρητικότητας ρευστού [J/KgK]

λ_f : συντελεστής αγωγιμότητας ρευστού [W/mK]

a_f : θερμική διαχυτότητα ρευστού [m²/s]

D_c : διαχυτότητα μάζας (mass diffusivity) [m²/s]

Δείκτες

c: συστατικό που διαχέεται

f: ρευστό (fluid)

Η δομή μιας φλόγας αλλάζει για αριθμούς Lewis μικρότερης της μονάδας. Βέβαια για μεγάλο εύρος αερίων μιγμάτων όπως πχ. μεθάνιο/αέρας ο αριθμός Lewis είναι κοντά στην μονάδα οπότε αμελείται η επίδραση της διάχυσης μάζας. Υπάρχουν όμως άλλα μίγματα όπως υδρογόνο/αέρα ή υδρογόνο/χλωρίου με αριθμό Lewis στο 0,4, οπότε εκεί πρέπει να ληφθεί υπόψη η διάχυση μάζας και ο σχεδιασμός για την σταθεροποίηση της φλόγας πέραν του αριθμού Peclet πρέπει να λάβει υπόψη και τη διάχυση μάζας και άρα τον αριθμό Lewis.



2.2 Σημαντικοί παράμετροι παραγωγής υδρογόνου από T-POX διεργασία μεθανίου

Υπάρχουν κάποιοι σημαντικοί παράμετροι οι οποίοι έχουν σημαντική επίδραση στην παραγωγή του syngas. Αυτοί είναι η αρχική προθέρμανση του μίγματος, ο χρόνος παραμονής που σχετίζεται με την θερμική φόρτιση, ο λόγος ισοδυναμίας αέρα καυσίμου και καθώς και οι ιδιότητες του πορώδους μέσου.

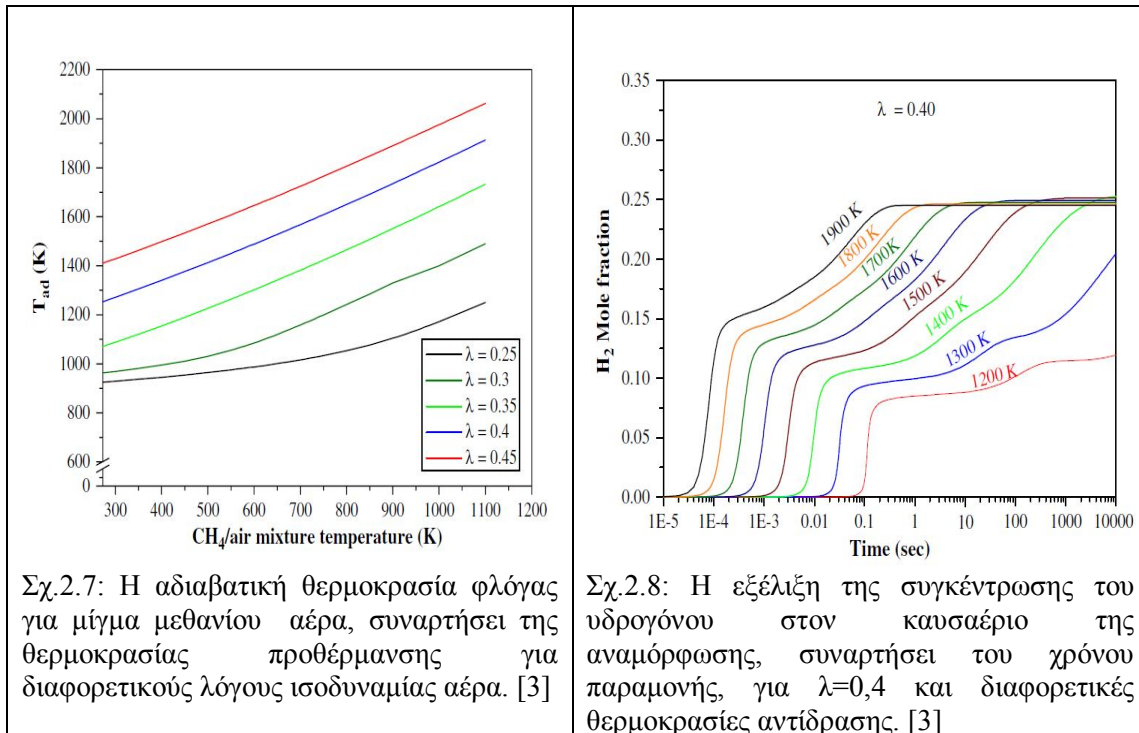
Αρκετές αριθμητικές και πειραματικές προσομοιώσεις που εξετάζουν τις παραπάνω παραμέτρους έχουν διενεργηθεί για την περίπτωση αναμόρφωσης μεθανίου στο Πολυτεχνείο του Freiberg της Γερμανίας (TU-Bergakademie Freiberg, Institute of thermal Engineering, Gas and Heat Technology)[1],[2],[3]. Ο πρότυπος αναμορφωτής, ο οποίος θα χρησιμοποιηθεί για αριθμητικές προσομοιώσεις σε αυτή την διπλωματική εργασία στην παράγραφο 3.5, έχει τον ίδιο γεωμετρικό σχεδιασμό με τον αναμορφωτή που μελετήθηκε στις [1],[2],[3]. Λεπτομέρειες της γεωμετρίας θα δοθούν στην προαναφερθείσα παράγραφο.

Επομένως θεωρήθηκε σκόπιμο για την καλύτερη κατανόηση των φαινομένων της T-POX διεργασίας, να γίνει μία ανασκόπηση μέσω διερεύνησης προηγούμενων εργασιών των θεμάτων που σχετίζονται με την αναμόρφωση, και να δούμε τις καινούριες πτυχές των προβλημάτων που θα μπορέσουν να αποτελέσουν κομμάτι διερεύνησης στην παρούσα διπλωματική εργασία.

2.2.1 Ισορροπία και χημικά φαινόμενα σε μερική οξείδωση

Όταν λέμε κινητική μελέτη (kinetic study) της διεργασίας, εννοούμε εκείνους του υπολογισμούς που μας πληροφορούν για το πόσο γρήγορα γίνεται η αντίδραση κάτω από διαφορετικές συνθήκες όπως πχ. διαφορετική περίσσεια αέρα και θερμοκρασία λειτουργίας. Με την σύνδεση της κινητικής και θερμοδυναμικής εξέτασης της διεργασίας είναι δυνατόν να προσδιοριστούν οι βέλτιστες παράμετροι λειτουργίας. Από την κινητική ανάλυση που διενεργήθηκε στο TU-Bergakademie Freiberg με σκοπό την διερεύνηση της κινητικής συμπεριφοράς της T-POX διεργασίας με μεθάνιο, διερευνήθηκε τί επίδραση έχει το μέγεθος της θερμοκρασίας και του λόγου αέρα στην τελική παραγωγή υδρογόνου.

Στο παρακάτω σχήμα 2.7 φαίνεται η επίδραση της θερμοκρασίας προθέρμανσης στην αδιαβατική θερμοκρασία φλόγας μίγματος μεθανίου/αέρα. Οι θερμοκρασίες άνω των 1900 K πρέπει να αποφεύγονται γιατί μπορεί να καταστρέψουν τον αντιδραστήρα. Ταυτόχρονα όμως θα πρέπει να έχουμε κατά το δυνατόν υψηλή θερμοκρασία ώστε να εξασφαλίζεται γρήγορη κινητική της αντίδρασης και άρα η πλήρης μετατροπή των αντιδρώντων σε έναν αναμορφωτή λογικού μεγέθους. Ενώ στο σχήμα 2.8 φαίνεται παραγωγή του υδρογόνου συναρτήσει του χρόνου παραμονής για διαφορετικές θερμοκρασίες και για λόγο αέρα $\lambda=0.40$.



Σχ.2.7: Η αδιαβατική θερμοκρασία φλόγας για μίγμα μεθανίου αέρα, συναρτήσεως της θερμοκρασίας προθέρμανσης για διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα. [3]

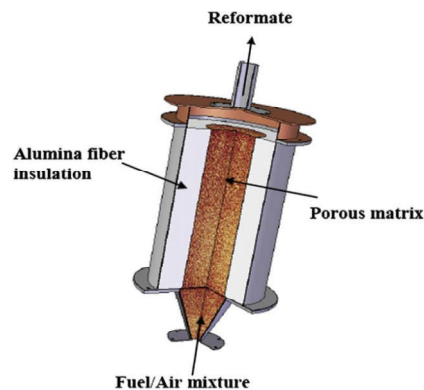
Σχ.2.8: Η εξέλιξη της συγκέντρωσης του υδρογόνου στον καυσαέριο της αναμόρφωσης, συναρτήσεως του χρόνου παραμονής, για $\lambda=0,4$ και διαφορετικές θερμοκρασίες αντίδρασης. [3]

Από το σχήμα 2.8 φαίνεται η θερμοκρασία αντίδρασης δεν έχει σημαντικό ρόλο στην τελική συγκέντρωση του H_2 ή ακόμα γενικότερα η επίδραση στην τελική σύνθεση του *syngas* είναι πολύ μικρή. Αυτό είναι ξεκάθαρο για θερμοκρασίες άνω των $1400^\circ K$ ενώ μπορεί να λεχθεί το ίδιο και για τις θερμοκρασίες των $1300^\circ K$ και $1400^\circ K$ για μεγάλους χρόνους παραμονής. Η θερμοκρασία αντίδρασης όμως έχει σημαντική επίδραση στο χρόνο που επέρχεται η χημική ισορροπία (*equilibrium time*). Για θερμοκρασία $1900 K$ ο χρόνος που επέρχεται χημική ισορροπία είναι 0.1 sec , ενώ για $1400 K$ αυτός ο χρόνος είναι 1000 sec . Από τα σχήματα 2.7 και 2.8 μπορεί να φανεί ότι η θερμοκρασία προθέρμανσης $1000 K$ σε μίγμα με $\lambda=0.4$ η αδιαβατική θερμοκρασία φλόγας είναι $1700 K$. Σε αυτή την περίπτωση το κλάσμα mole του H_2 θα είναι στο 20% σε 1 sec .

Για χαμηλότερους λόγους αέρα, απαιτείται υψηλότερη προθέρμανση ώστε να έχουμε τέτοιες αδιαβατικές θερμοκρασίες που θα μας φτάνουν την χημική ισορροπία σε μικρούς χρόνους παραμονής. Με μεγάλη προθέρμανση όμως αυξάνεται ο κίνδυνος αυτανάφλεξης. Σύμφωνα με αυτό μπορεί να καθοριστεί πρακτικά ένα κάτω όριο λόγου αέρα $\lambda=0.4$ για T-POX μεθανίου.

2.2.2 Μελέτες αναμόρφωσης σε TPOX μεθανίου για Θερμική φόρτιση/Προθέρμανση/Soot point

Όπως αναφέρεται στο [3] έγιναν δοκιμές σε πρότυπο αναμορφωτή που φαίνεται στο σχήμα 2.9 Μετρήθηκαν οι θερμοκρασίες στον κεντρικό άξονα του αναμορφωτή, οι συγκεντρώσεις H_2 , CO , CO_2 , CH_4 , O_2 , C_2H_2 , H_2O . Δοκιμάστηκαν δύο πορώδη Al_2O_3 static mixer και SiC foam (10 ppi). Τα πειράματα εκτελέστηκαν για διαφορετικές προθερμάνσεις, λόγους αέρα και θερμικές φορτίσεις. Επίσης για την κάθε περίπτωση διερευνήθηκε το σημείο όπου παρουσιάζεται αιθάλη (soot point) σύμφωνα με το τεστ του Bacharach. Οι χρόνοι παραμονής στον αναμορφωτή (μήκους 400 mm) είναι στο εύρος από $2,45 \text{ sec}$ στα 3 kW έως $0,29 \text{ sec}$ στα 30 kW .



Σχ. 2.9: Μία 3D αναπαράσταση του TPOX αναμορφωτή

- Επίδραση της θερμικής φόρτισης

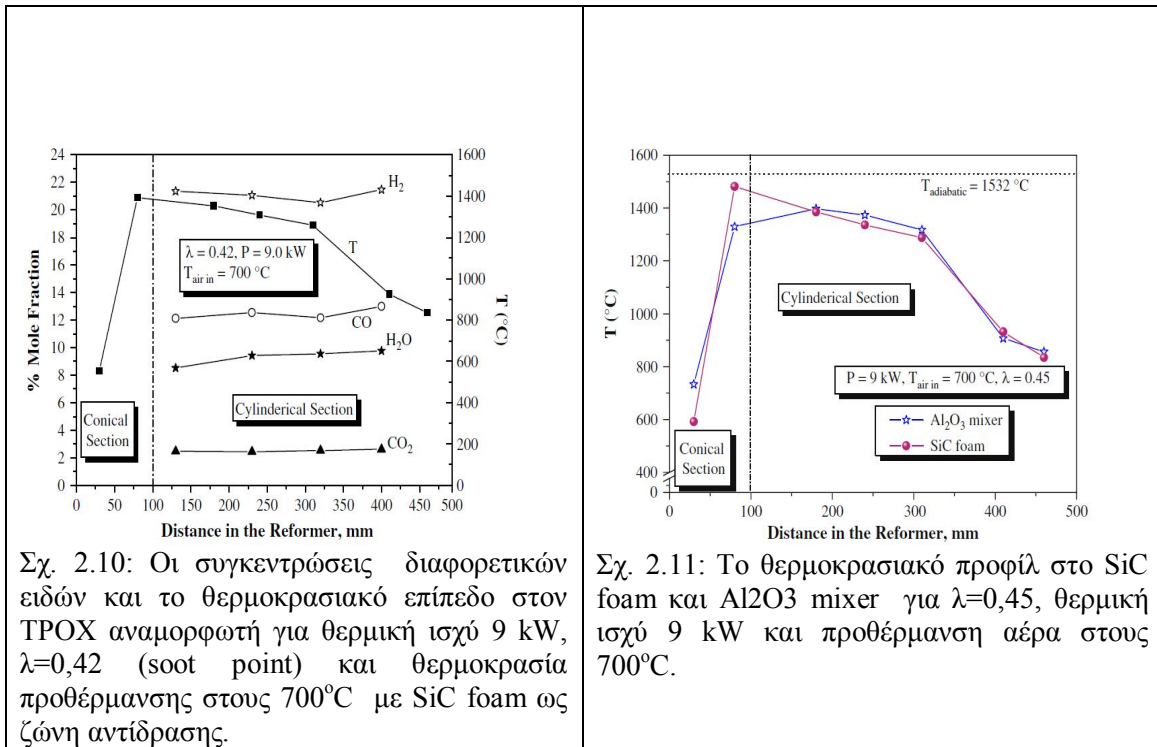
Τα αποτελέσματα από την πειραματική μελέτη [3] έδειξαν ότι η συγκέντρωση του H_2 ήταν υψηλότερη για υψηλότερες θερμικές φορτίσεις αν και ο χρόνος παραμονής ήταν μικρότερος. Αυτό συνέβη διότι οι θερμικές απώλειες ήταν υψηλότερες για υψηλότερες θερμικές φορτίσεις σε σύγκριση με τις περιπτώσεις των χαμηλών. Συνεπώς, χαμηλότερο θερμοκρασιακό προφίλ μετρήθηκε στην περίπτωση των χαμηλών θερμικών φορτίσεων. Επιπλέον φάνηκε ότι το θερμοκρασιακό επίπεδο μειώθηκε κατάντη εξαιτίας των θερμοκρασιακών απωλειών. Επομένως η εμφάνιση της αιθάλης (soot point) σε υψηλότερες θερμικές ισχύς εμφανίστηκε σε χαμηλότερους λόγους ισοδυναμίας αέρα σε σχέση με τις χαμηλές θερμικής ισχύς.

- Επίδραση της προθέρμανσης

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα την κινητικής μελέτης [3] και από τα πειραματικά αποτελέσματα, φάνηκε ότι η προθέρμανση αέρα είχε χαμηλή επίδραση στην τελική συγκέντρωση του παραγόμενου H_2 . Ωστόσο, η προθέρμανση επιδρά στο θερμοκρασιακό προφίλ και στο soot point.

- Soot point

Καθώς είπαμε το soot point εξαρτάται από τη προθέρμανση [3]. Το soot point είναι εκείνο το σημείο στο οποίο επικρατούν εκείνες οι συνθήκες που ευνοούν την παραγωγή αιθάλης (soot). Για το Al_2O_3 static mixer και $500^\circ C$ το soot point εντοπίστηκε για $\lambda=0.45$ ενώ για $\lambda=0.48$ στους $700^\circ C$. Το SiC foam είναι δυνατόν να λειτουργήσει σε χαμηλότερους λόγους αέρα σε σύγκριση με το Al_2O_3 static mixer. Αυτό γιατί το soot point εντοπίστηκε σε χαμηλότερο λόγο αέρα, όπως θα δούμε στην συνέχεια, εξαιτίας της περισσότερης ανακυκλοφορίας θερμότητας που έχει ως υλικό, σύμφωνα με το φαινόμενο που περιγράψαμε στην ενότητα 1.3.



Στην παρούσα διπλωματική εργασία ως υλικό του πορώδους για προσομοίωση θα χρησιμοποιήσουμε το SiC foam αντί του Al₂O₃ mixer καθώς για τις ίδιες οριακές συνθήκες έχει μεγαλύτερο θερμοκρασιακό επίπεδο όπως φαίνεται από το σχήμα 2.11, που σημαίνει ότι μπορούμε να πάμε σε χαμηλότερα λ , όπως είπαμε, μέχρι να εμφανιστεί το soot point. Πρακτικά μπορεί να φτάσει στο $\lambda=0,42$ για προθέρμανση στους 700°C στα 9 kW (εμφάνιση soot point) σχήμα 2.10. Επίσης η θέση της μετρούμενη μέγιστης θερμοκρασίας, δηλαδή η θέση σταθεροποίησης της φλόγας, είναι μετατοπισμένη ανάντη της θέσης που εντοπίζεται για το Al₂O₃ mixer. Αυτό αποδεικνύει και την μεγαλύτερη θερμική ανακυκλοφορία εξαιτίας της υψηλής αγωγιμότητας του SiC. Η αγωγιμότητα του είναι (20-50 W/mK στους 1000°C) ενώ της αλουμίνας (5-6 W/mK στους 1000°C) και επίσης δείχνει υψηλότερη emissivity (almost black body) από την κατασκευή της αλουμίνας. Συνεπώς για όλους αυτούς τους λόγους παράγεται υψηλότερη ποσότητα υδρογόνου.

2.3 Αναγέννηση της αιθάλης

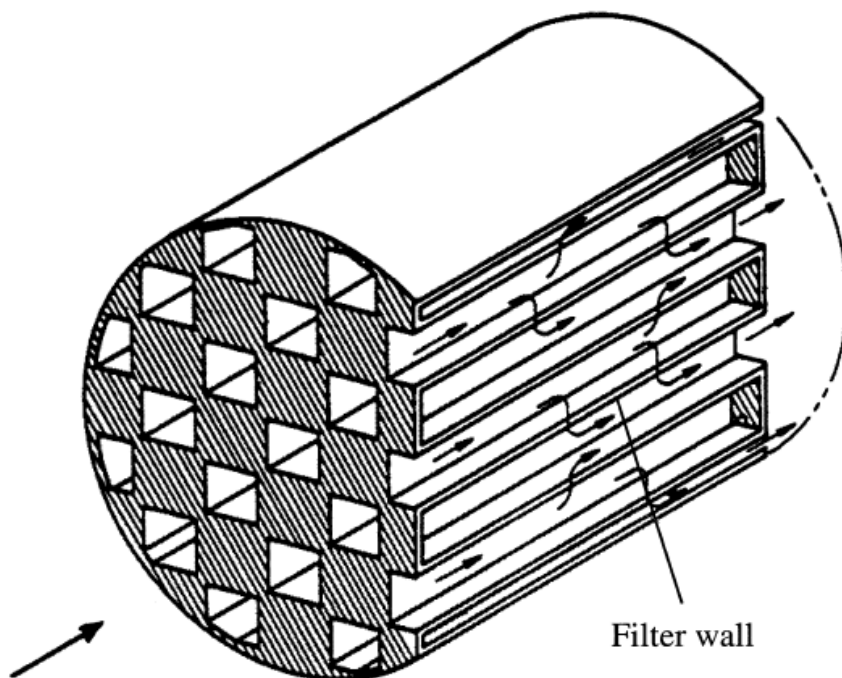
Σύμφωνα με τα όσα ήδη έχουμε αναφέρει, σε μία T-POX διεργασία όσο χαμηλώνουμε το λ τόσο μεγαλύτερη παραγωγή H₂ λαμβάνουμε, αλλά ταυτόχρονα, αν κατέβουμε για λόγο αέρα κάτω από το soot point (λ_c), αυξάνεται η παραγωγή αιθάλης (soot), η οποία επικάθεται στην άνοδο της κυψέλης καυσίμου με αποτέλεσμα την σταδιακή απενεργοποίηση της.

Μια λύση για την αποφυγή παραγωγής soot σε χαμηλά λ με τα όσα είδαμε στην προηγούμενη ενότητα είναι να προθερμάνουμε (preheat) το καύσιμο και τον αέρα εισόδου ώστε να μετατοπίσουμε το soot point (λ_c) σε μικρότερες τιμές σε σχέση με το λ λειτουργίας. Ενδεικτικά είδαμε ότι με προθέρμανση στους 700°C, και με συνδυασμό καύσης η θερμοκρασία αντίδρασης είναι 1400°C (σχήματα 2.7 και 2.8) και ότι σε αυτή την περίπτωση για πορώδες

SiC foam το soot point εμφανίζεται, στο αρκετά χαμηλό $\lambda=0,42$ στο οποίο επομένως μπορούμε να έχουμε λειτουργία χωρίς πρόβλημα παραγωγής soot. Αν όμως θέλαμε λειτουργία σε ακόμα χαμηλότερο λ θα έπρεπε να αυξήσουμε και άλλο την προθέρμανση ώστε το λ_c (εμφάνισης του soot point) να είναι μικρότερο του λ που θέλουμε να λειτουργήσουμε. Το πρόβλημα είναι ότι από κάποιο σημείο και μετά δεν υπάρχει δυνατότητα περισσότερης προθέρμανσης καθώς αυξάνεται ο κίνδυνος αυτανάφλεξης και για πολύ χαμηλά λ δεν υπάρχει και η τεχνική δυνατότητα.

Επομένως αν πάμε σε χαμηλότερα λ με σκοπό την περισσότερη παραγωγή υδρογόνου, η παραγωγή αιθάλης είναι αναπόφευκτη και θα πρέπει να βρεθούν τρόποι αντιμετώπισης της.

Η απομάκρυνση της αιθάλης μπορεί να γίνει ιδιαίτερος προβληματική σε αυτές τις διατάξεις εξαιτίας της απουσίας οξυγόνου στο syngas. Οι κλασικές διαδικασίες για την αναγέννηση του άνθρακα στην παγίδα αιθάλης, δηλαδή η αεριοποίηση του, όπως οι τεχνολογίες που έχουν υιοθετηθεί στις μηχανές Diesel δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν για παθητική αναγέννηση διότι αυτές η τεχνολογίες βασίζονται στην καύση. Πιο συγκεκριμένα, οι παγίδες αιθάλης οι οποίες εισήχθησαν από την αυτοκινητοβιομηχανία είναι φίλτρα κατακράτησης σωματιδίων DPF (Diesel Particulate Filters) σχήμα 2.12 με κεραμικές πορώδεις δομές, στα οποία συσσωρεύονται τα σωματίδια άνθρακα με αποτέλεσμα την σταδιακή αύξηση της πτώσης πίεσης του συστήματος.

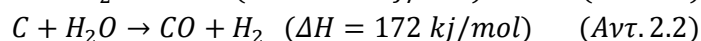
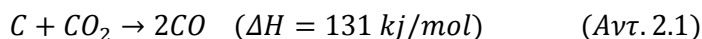


Σχ. 2.12: Φίλτρο κατακράτησης σωματιδίων (Wall flow filter)

Για να παραμείνει το σύστημα στις σωστές συνθήκες λειτουργίας του, είναι απαραίτητη μία διαδικασία απομάκρυνσης αυτών των σωματιδίων άνθρακα. Η διαδικασία είναι να καούν με οξυγόνο και ονομάζεται *αναγέννηση* (regeneration). Ωστόσο, δεδομένου ότι αέριο της αναμόρφωσης που παράγεται προορίζεται για την τροφοδότηση μίας SOFC κυψέλης, δεν είναι εύκολο να εφαρμόσουμε αυτή την διαδικασία αναγέννησης με O_2 , διότι το οξυγόνο για θερμοκρασίες άνω των $500^\circ C$ μπορεί στην πραγματικότητα να οξειδώσει τον καταλύτη στην άνοδο της κυψέλης καυσίμου, ο οποίος βασίζεται στο Ni και γι' αυτό θα πρέπει να

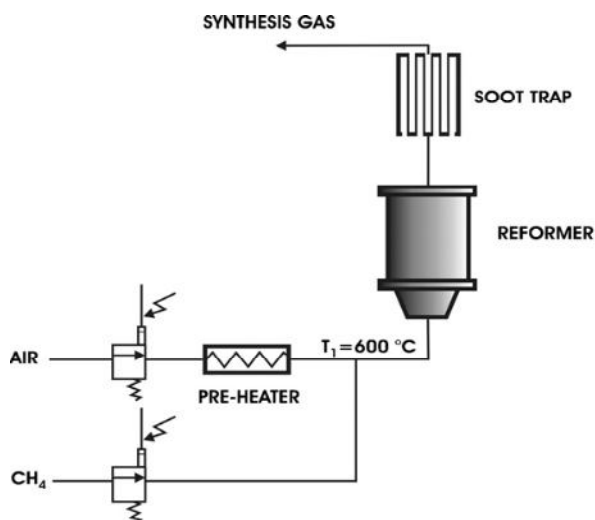
αναζητηθούν άλλες λύσεις. Μια υποσχόμενη λύση η οποία προτείνεται, είναι η αεριοποίηση της αιθάλης στο soot trap μέσω του syngas που έχει παραχθεί από την αναμόρφωση.

Το syngas που παράγεται από την αναμόρφωση αποτελείται κυρίως H_2, CO, H_2O, CO_2 και από ένα όχι τόσο αμελητέο ποσοστό C_2H_2 (η ύπαρξη του οποίου σχετίζεται με την παραγωγή της αιθάλης). Η πιθανότητα αεριοποίησης της αιθάλης μέσα σε μία ειδική ατμόσφαιρα υδρατμών και CO_2 (κύρια συστατικά syngas) μπορεί να γίνει θεωρητικά πραγματοποιήσιμη αν έχουμε συνεχή λειτουργία σε υψηλές θερμοκρασίες άνω των $700^\circ C$, σύμφωνα με τις ακόλουθες αντιδράσεις:



Ιδίως η αντίδραση 2.1 η οποία καλείται και αμφίδρομη αντίδραση του Boudouard (K. Nagase et al. 1999) παρουσιάζει ενδιαφέρουσες ιδιότητες αεριοποίησης του άνθρακα σε κοινές θερμοκρασίες λειτουργίας ενός συστήματος βασισμένο στα SOFC, ακόμα και με την απουσία καταλύτη (M. Haghghi et al. 2007, T. Osaki et al. 2006).

Με την τοποθέτηση ενός φίλτρου ή παγίδα αιθάλης (soot trap) ακριβώς μετά τον TPOX αναμορφωτή κάνουμε ένα διαχωρισμό των χρόνων ροής και αεριοποίησης του άνθρακα (decoupling time scales) δίνοντας περισσότερο χρόνο στον άνθρακα να αεριοποιηθεί μέσα στο soot trap. Είναι μία απλή λύση για την κατακράτηση της αιθάλης και την προστασία της ανόδου της κυψέλης, ενώ εγγυάται την καλή απόδοση της για μεγάλο χρονικό διάστημα καθώς και τις εκπομπές σωματιδίων που απαιτούνται σύμφωνα με την ισχύουσα νομοθεσία.



Σχ. 2.13: Σχηματική αναπαράσταση συστήματος αναμόρφωσης με ενσωματωμένο το soot trap [4].

Η δυνατότητα αυτοαναγέννησης της αιθάλης στο soot trap έχει ήδη διερευνηθεί. Η διάταξη του παραπάνω σχήματος 2.13 προέρχεται από την [4] στην οποία εξετάστηκε το θέμα της απομάκρυνσης του soot από το syngas. Η μελέτη αυτή διεξήχθη στο Department of Materials Science and Chemical Engineering, Politecnico di Torino. Σε αυτό το πείραμα αποδείχθηκε η δυνατότητα της συνεχούς αεριοποίησης του άνθρακα με τη χρήση του ίδιου του syngas αερίου, για υψηλές θερμοκρασίες μέσα στο soot trap (αξιοσημείωτη αεριοποίηση του άνθρακα παρατηρήθηκε για θερμοκρασίες άνω των $900^\circ C$).



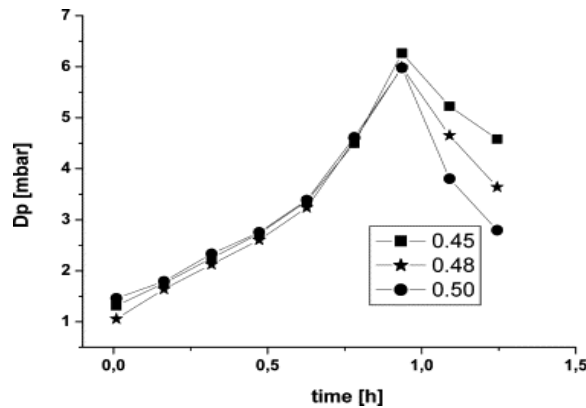
Δηλαδή αποδείχθηκε η δυνατότητα καθιέρωσης μιας δυναμικής ισορροπίας όπου ο άνθρακας που παράγεται από τον reformer συσσωρεύεται και αεριοποιείται διαμέσου του soot trap (wall-flow filter) διατηρώντας έτσι σταθερή πίεση στο σύστημα. Το παραπάνω επίτευγμα είναι πολύ σημαντικό βήμα για την ανάπτυξη συστήματος παραγωγής syngas για την τροφοδότηση HTFC (High Temperature Fuel Cells) δηλαδή SOFCs και MOFCs για μικρών διαστάσεων εφαρμογές.

Δυο ακόμα λεπτομερείς διερευνήσεις σχετικά με το θέμα της αυτοαναγέννησης της αιθάλης [1], [2] και σχετικά θέματα έχουν πραγματοποιηθεί στο TU-Bergakademie Freiberg, Institute of thermal Engineering, Gas and Heat Technology το 2010 και 2011. Στην συνέχεια θα κάνουμε μία ανάλυση αυτών των μελετών για την πλήρη κάλυψη του θέματος της αναγέννησης και για να δείξουμε την νέα ιδέα που προκύπτει και θα αποτελέσει το δεύτερο κομμάτι αυτής της διπλωματικής εργασίας.

Στις μελέτες [1] και [2] διερευνήθηκε η επίδραση των παραμέτρων: προθέρμανσης αέρα με διαφορετικές θερμικές φορτίσεις, καθώς και η επίδραση του λ στην συσσώρευση/αεριοποίηση του soot μέσα σε ένα soot trap τοποθετημένο μετά από τον αναμορφωτή όπως στο σχήμα 2.13. Το soot trap αποτελείται από ένα SiC wall-flow filter (fig.2.12) το οποίο παρουσιάζει πολύ υψηλή αποδοτικότητα φιλτραρίσματος έως και 99%. Επίσης είναι πορώδες κεραμικό με σκοπό να επιτρέπει στα καυσαέρια να περνούν ενώ συγκρατεί τα σωματίδια άνθρακα. Σε συστήματα αναμόρφωσης σε ειδικές περιπτώσεις και σε πραγματικές συνθήκες η επιτρεπόμενη πτώση πίεση στο φίλτρο μπορεί να θεωρείται γύρω στα 10 mbar. Γι' αυτό είναι και αναγκαίο να προσδιορισθεί η κατάλληλη στρατηγική που θα ακολουθηθεί για την αναγέννηση του άνθρακα και την επαναφορά του συστήματος στις σωστές συνθήκες λειτουργίας. Αντί της επιλογής να σταματήσει το σύστημα για τον καθαρισμό του φίλτρου, εξετάστηκε η αναγέννηση και η επίδραση κάποιων παραμέτρων όπως ήδη αναφέραμε ώστε να συμβαίνει σε συνεχή λειτουργία. Για να γίνει αυτό είναι αναγκαία η λειτουργία σε ένα συγκεκριμένο εύρος τιμών λ τα οποία καθορίστηκαν στις μελέτες [1] και [2]. Η δυναμική του soot (αεριοποίηση/συσσώρευση) καταγράφηκε εμμέσως από την μετρούμενη πτώση πίεσης του φίλτρου. Ενώ η θερμοκρασίες του πειράματος ήταν άνω των 800°C ώστε να ευνοούνται οι αντιδράσεις 2.1 and 2.2.

2.3.1 Επίδραση του λόγου ισοδυναμίας αέρα στην αναγέννηση

Το φαινόμενο της αναγέννησης διερευνήθηκε για ένα μεγάλο εύρος συνθηκών λειτουργίας στο [2]. Φάνηκε ότι ήταν δυνατόν να ελεγχθεί η πτώση πίεσης στο soot trap εφόσον το σύστημα λειτουργούσε σε συγκεκριμένες τιμές του λόγου ισοδυναμίας αέρα. Ειδικότερα για υψηλές τιμές του φάνηκε ταχεία αναγέννηση.



Σχ. 2.14: Αξιολόγηση της επίδρασης του λόγου ισοδυναμίας αέρα στην αναγέννηση. (Θερμική ισχύς 8kW, λόγος ισοδυναμίας αέρα συσσώρευσης του φίλτρου με αιθάλη 0.4, θερμοκρασία προθέρμανσης 550°C)

2.3.2 Επίδραση προθέρμανσης αέρα στην αναγέννηση

Η επίδραση της προθέρμανσης στην αναγέννηση αξιολογήθηκε επίσης στην ίδια πειραματική μελέτη [2]. Φάνηκε ότι ο προθέρμανση έχει πολύ μικρή επίδραση στην συσσώρευση της αιθάλης αλλά φάνηκε να σχετίζεται με το ότι αυτή συσσώρευση γινόταν με αργότερο ρυθμό στα κανάλια του φίλτρου. Αυτή η θετική επίδραση θα μπορούσε ωστόσο να συσχετιστεί με αποδοτικότερη αναμόρφωση και λιγότερη ποσότητα παραγόμενων σωματιδίων (σχ.2.15 και 2.16).

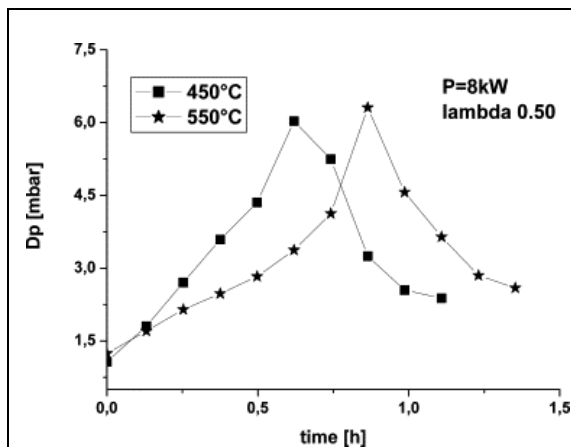


Fig.2.15:Αξιολόγηση επίδρασης προθέρμανσης στην αναγέννηση άνθρακα στο soot trap για $\lambda=0.50$ (θερμική φόρτιση 8kW, λ για συσσώρευση 0.40)

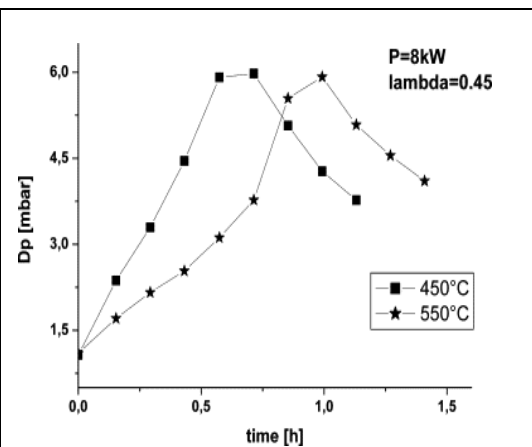


Fig. 2.16: Αξιολόγηση επίδρασης προθέρμανσης στην αναγέννηση άνθρακα στο soot trap για $\lambda=0.45$ (θερμική φόρτιση 8kW, λ για συσσώρευση 0.40)

2.4 Περιληπτικά οι στόχοι της εργασίας

Η παρούσα εργασία αποτελείται από δύο κομμάτια. Ένα κομμάτι προσομοίωσης και ένα πειραματικό. Ο κύριος σκοπός της πειραματικής διερεύνησης είναι να αξιολογήσει έναν πρότυπο αναμορφωτή καυσίμου σε σχέση με λειτουργικά χαρακτηριστικά του, την αποδοτικότητα του και να αξιολογηθεί η δυνατότητα αναγέννησης σε πολύ χαμηλούς λόγους ισοδυναμίας αέρα καυσίμου. Αυτός ο πρότυπος αναμορφωτής θα χρησιμοποιήσει ως πορώδη κεραμική δομή ένα wall flow filter ή όπως καλείται soot trap, για λόγους που εξηγούνται παρακάτω.

Η αναγέννηση της αιθάλης, όπως αναφέρθηκε στην παράγραφο 2.3 είναι δυνατή κάτω από ορισμένες συνθήκες. Ειδικότερα ο λόγος ισοδυναμίας αέρα, η θερμοκρασία και η συγκέντρωση του νερού στο syngas είναι σημαντικοί παράμετροι που καθορίζουν την αναγέννηση.

Από προηγούμενες διερευνήσεις σε T-POX αντιδραστήρες, όπως στις [1],[4], η συγκράτηση της αιθάλης καθώς και η αναγέννηση της πραγματοποιούνταν μέσα στο wall flow filter ή DPF φίλτρο το οποίο ήταν τοποθετημένο αμέσως μετά τον αντιδραστήρα. Η θερμοκρασία του syngas όταν έφτανε στο φίλτρο, είχε μειωθεί κατά 400 με 500 °C εξαιτίας των θερμικών απωλειών οι οποίες ήταν δύσκολο να περιοριστούν ακόμα και με καλή μόνωση. Ειδικότερα, για θερμοκρασίες 900°C στο DPF, ο λόγος ισοδυναμίας αέρα εμφάνισης της αιθάλης (soot point) ήταν 0,45. Αν υπήρχε η δυνατότητα να εξαλείψουμε της θερμικές απώλειες και να διατηρήσουμε υψηλά θερμοκρασιακά επίπεδα, τότε το soot point θα εμφανιζόταν σε χαμηλότερους λόγους ισοδυναμίας αέρα. Αυτό βεβαίως θα σήμαινε καλύτερη αποδοτικότητα από την άποψη παραγωγής περισσότερου υδρογόνου. Ωστόσο οι περιορισμοί στην τεχνολογία της μόνωσης δεν μας επιτρέπει να διατηρήσουμε αυτό το υψηλό θερμοκρασιακό επίπεδο στο τοποθετημένο DPF μετά τον αντιδραστήρα.

Μία εναλλακτική λύση θα ήταν να ενσωματώσουμε το DPF φίλτρο μέσα στον αντιδραστήρα επιτυγχάνοντας πιθανότατα χαμηλότερους λόγους ισοδυναμίας αέρα εμφάνισης της αιθάλης, λόγο υψηλότερου θερμοκρασιακού επιπέδου, αύξηση της αποδοτικότητας στο παραγόμενο υδρογόνο, διατήρηση της λειτουργίας του στην κατακράτηση της αιθάλης και διατήρηση του χαρακτηριστικού της κεραμικής δομής που χρησιμοποιείται στους αναμορφωτές καθώς το DPF φίλτρο είναι πορώδες κεραμικό υλικό. Αυτός ο αναμορφωτής καυσίμου βασισμένος σε ένα wall flow filter (ή όπως αλλιώς μπορεί να ονομαστεί DPF ή soot trap) θα μελετηθεί στην παρούσα εργασία.

Σκοπός της αριθμητικού κομματιού που θα πραγματοποιηθεί στο ANSYS-Fluent είναι η προσομοίωση της χημικής κινητικής, εισάγοντας ένα μειωμένο χημικό μηχανισμό (reduced GRI-Mech) στην απλοποιημένη γεωμετρία του αναμορφωτή όπου το πεδίο του soot trap προσομοιώνεται ως γενικά ένα πορώδες πεδίο του οποίου οι απαιτούμενοι συντελεστές υπολογίζονται μέσω των χαρακτηριστικών του πραγματικού soot trap. Η εκτίμηση των συγκεντρώσεων των χημικών ειδών στο πεδίο του αναμορφωτή, η πτώση πίεσης του και η σύγκρισή τους με τα αποτελέσματα του πειραματικού κομματιού είναι ο κύριος στόχος αυτής της εργασίας. Επιπλέον η επίτευξη του προσδιορισμού των χημικών ειδών στο κωνικό κομμάτι της γεωμετρίας που θα περιγραφεί στην συνέχεια, από μια σωστή συνολικά προσομοίωση μπορεί να χρησιμοποιηθούν σε μία μελλοντική εργασίας ως είσοδος σε μία συμμετρική γεωμετρία ενός απομονωμένου καναλιού του soot trap όπου θα προσομοιωθεί και θα μελετηθεί η αντιδρούσα ροή μέσα σε αυτό.

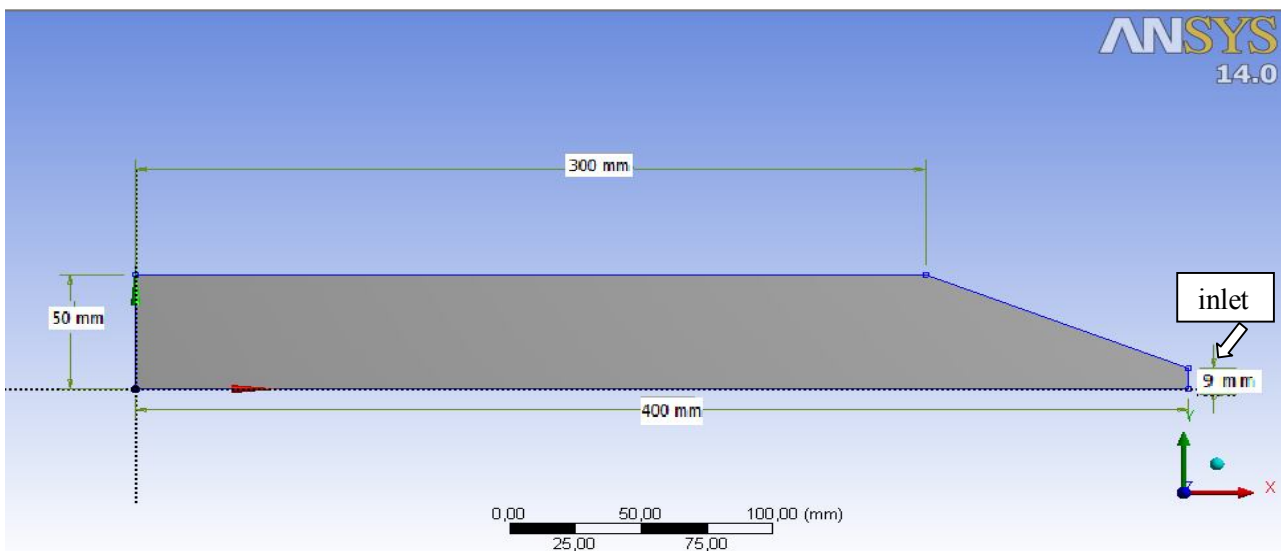
Κεφάλαιο 3^ο : Ανάπτυξη αριθμητικού μοντέλου του T-POX αναμορφωτή

3.1 Η 2D γεωμετρία του αναμορφωτή

Και οι δύο γεωμετρίες των μοντέλων που περιγράφονται στην συνέχεια είναι σχεδιασμένα τα αξονοσυμμετρικά τους τμήματα, δεδομένου ότι προορίζονται για 2D προσομοιώσεις και περιέχουν κυλινδρικά και κωνικά κομμάτια.

1ο πρωτότυπο για προκαταρκτικές προσομοιώσεις

Η πρώτη γεωμετρία σχεδιάστηκε βασισμένη στο σχέδιο του αναμορφωτή που αναφέρεται στο [7]. Θα χρησιμοποιηθεί μόνο για προκαταρκτικές προσομοιώσεις, που στοχεύουν στην εξοικείωση με το περιβάλλον του ANSYS και με τα μοντέλα προσομοίωσης πορώδους σε αυτό. Επίσης με αυτό το μοντέλο θα γίνει μία παραμετρική ανάλυση της ροής σε μία προσομοίωση πορώδους (porous packed bed). Η γεωμετρία φαίνεται στο παρακάτω σχήμα 3.1. Αποτελείται από ένα κωνικό και κυλινδρικό κομμάτι. Είναι ένας τυπικός σχεδιασμό για λόγους που εξηγήθηκαν στην παράγραφο 2.1.2.



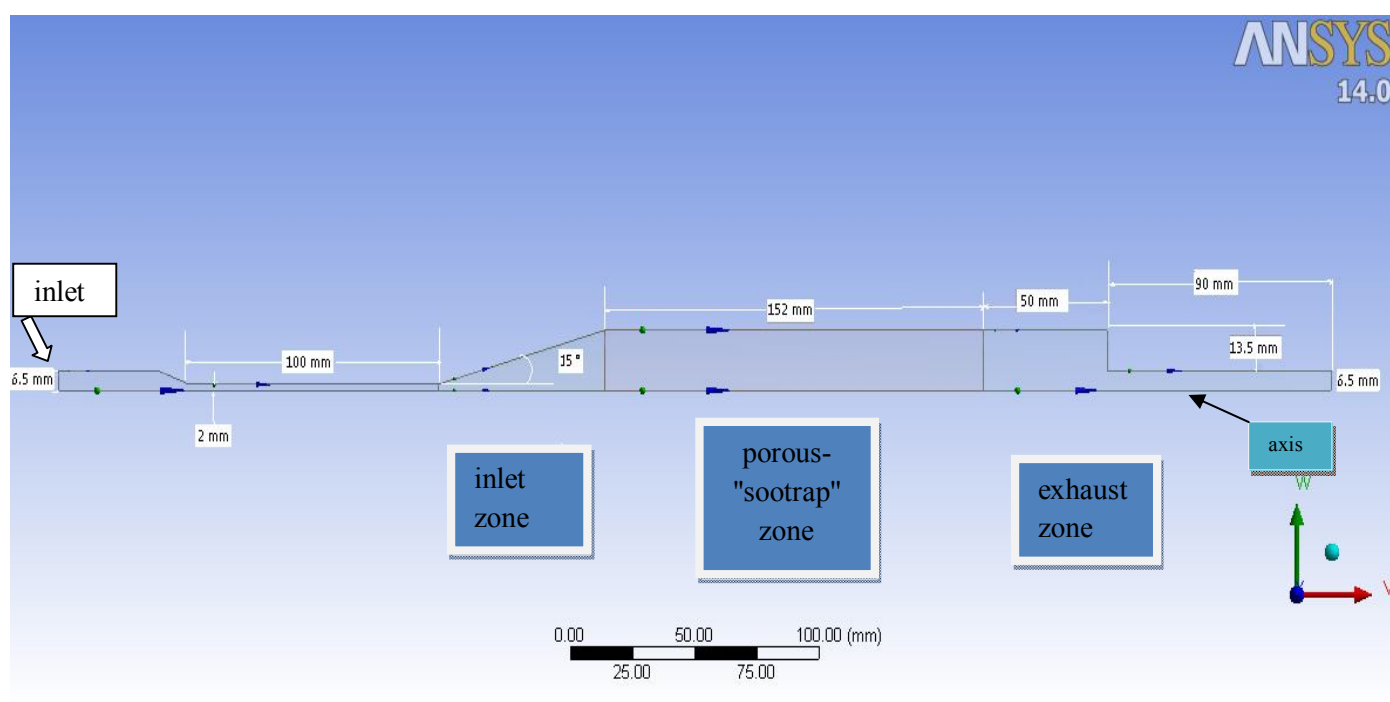
Σχ. 3.1: Η αξονοσυμμετρική γεωμετρία του πρώτου πρωτοτύπου

2ο πρωτότυπο για τελικές προσομοιώσεις

Η δεύτερη γεωμετρία σχεδιάστηκε στο TU Freiberg της Γερμανίας με σκοπό να διενεργηθούν προσομοιώσεις καθώς και πειραματική μελέτη για την αξιολόγηση του αναμορφωτή καυσίμου που βασίζεται σε soot trap. Η πειραματική μελέτη περιγράφεται στο κεφάλαιο 4, όπου υπάρχουν επίσης περισσότερα σχέδια και τομές του αναμορφωτή που σχεδιάστηκαν στο CAD Inventor της Autodesk. Αυτή η δεύτερη γεωμετρία θα χρησιμοποιηθεί για την προσομοίωση χημικής κινητικής η οποία είναι και ο στόχος της αριθμητικής προσομοίωσης της παρούσας εργασίας και παρουσιάζεται στο κεφάλαιο 5. Το πεδίο του soot trap δεδομένου ότι ήταν δύσκολο να προσομοιωθεί με την πραγματική του γεωμετρία, έγινε προσπάθεια να

προσομοιωθεί ως porous packed bed. Η γεωμετρία φαίνεται στο σχήμα 3.2 και σχεδιάστηκε στο Designed Modeler του ANSYS.

Όπως φαίνεται η γεωμετρία αποτελείται από ένα κωνικό και ένα κυλινδρικό κομμάτι, για λόγους σταθεροποίησης της φλόγας όπως εξηγήθηκε στην 2.1.2. Επιλέχθηκε μία μικρή διαμέτρου σωλήνα εισόδου για τα αντιδρώντα ώστε να αυξηθεί η ορμή και να αποτραπούν πιθανότητες πισωγυρίσματος της φλόγας (flashback) λόγω χαμηλών θερμικών ισχύων και επομένως χαμηλών ταχυτήτων για τις οποίες ήταν σχεδιασμένος ο αναμορφωτής. Από την σκοπιά της προσομοίωσης, η γεωμετρία αποτελείται από τρεις ζώνες, την ζώνη εισόδου, την ζώνη του πορώδους-"soottrap" και την ζώνη των καυσαερίων. Μόνο στην πορώδη ζώνη θεωρείται ότι υπάρχει το soottrap. Οι άλλες δύο ζώνες είναι άδαιοι χώροι. Στην κωνική ζώνη μας ενδιαφέρει να σταθεροποιηθεί το μέτωπο της φλόγας γι αυτό θα αποτελεί και την ζώνη αντίδρασης. Η γεωμετρία του αναμορφωτή βασισμένου σε soot trap, περιγράφεται περεταίρω στην 4.1.1.



Σχ. 3.2: Η αξονοσυμμετρική γεωμετρία του δεύτερου πρωτοτύπου

3.2 Πλέγμα και ανεξαρτησία λύσης

Η δημιουργία του πλέγματος είναι μία πολύ σημαντική πτυχή στις προσομοιώσεις. Πάρα πολύ πυκνό πλέγμα μπορεί να οδηγήσει σε μεγάλους υπολογιστικούς χρόνους ενώ πάρα πολύ αραιό σε μη ακριβείς αποτελέσματα. Με στόχο να φτιάξουμε ένα αντιπροσωπευτικό πλέγμα, η ανεξαρτησία του πλέγματος από την λύση έπρεπε να ελεγχθεί. Αυτή η διαδικασία είναι πολύ σημαντική και καλείται "ανεξαρτησία πλέγματος" ή "grid independence". Η ανεξαρτησία πλέγματος ελέγχθηκε και για τα δύο παραπάνω μοντέλα ξεχωριστά και παρουσιάζεται στην συνέχεια.

Αρχικά για να ελεγχθεί η ανεξαρτησία του πλέγματος έπρεπε να προσομοιωθούν περιπτώσεις με διαφορετικό αριθμό πυκνώματος κόμβων. Σε κάθε προσομοίωση το πύκνωμα αυξανόταν μέχρι να διαπιστωθεί ότι περαιτέρω πύκνωμά του δεν επηρέαζε την λύση της ταχύτητας του πεδίου.

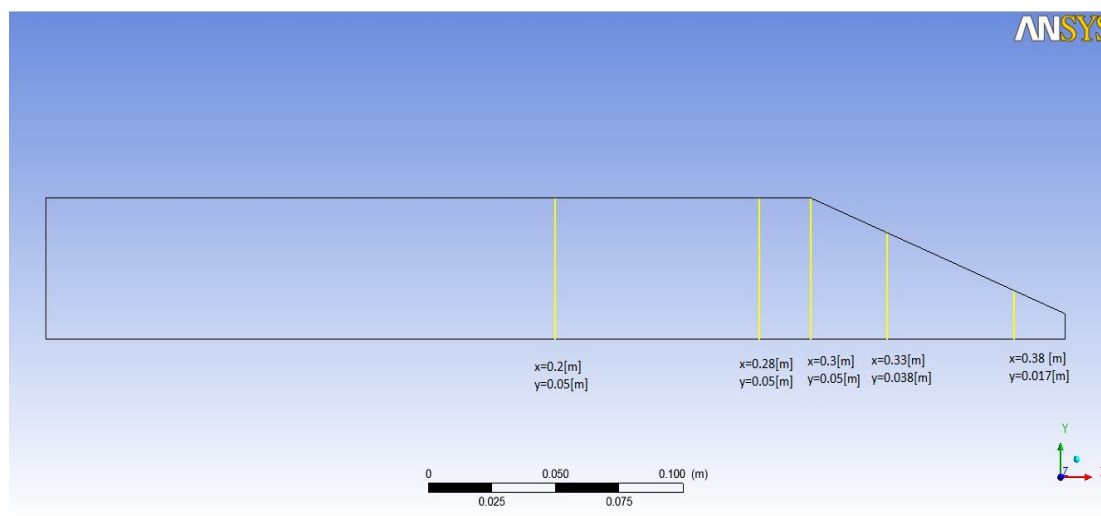
1ο πρότυπο προκαταρκτικών προσομοιώσεων

Τρία τρεξίματα διενεργήθηκαν για το πρώτο πρότυπο. Ο αριθμός των κόμβων του κάθε τρεξίματος φαίνεται στον ακόλουθο πίνακα 3.1

Πίνακας 3.1

Περιπτώσεις	Αριθμός κόμβων
a	21632
b	27604
c	38912

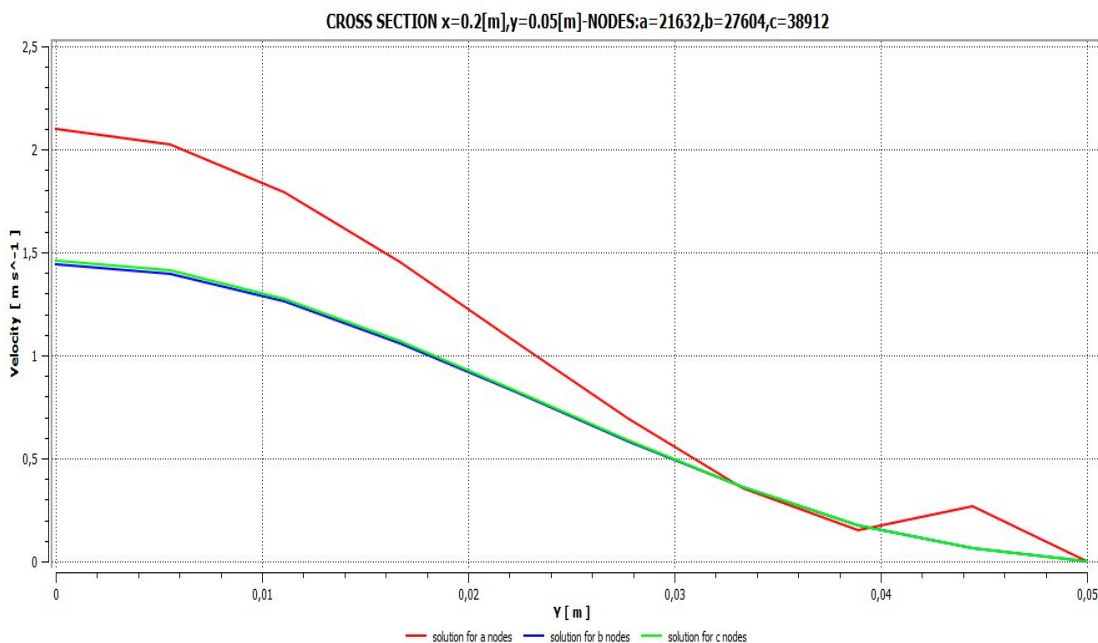
Για την κάθε περίπτωση παρουσιάζονται τα προφίλ της ταχύτητας διαφορετικές διατομές της γεωμετρίας στα σημεία που φαίνονται στο παρακάτω σχήμα 3.3.



Σχ. 3.3: Διαφορετικά σημεία διατομών όπου τα προφίλ της ταχύτητας για διαφορετικό αριθμό κόμβων παρουσιάζονται.

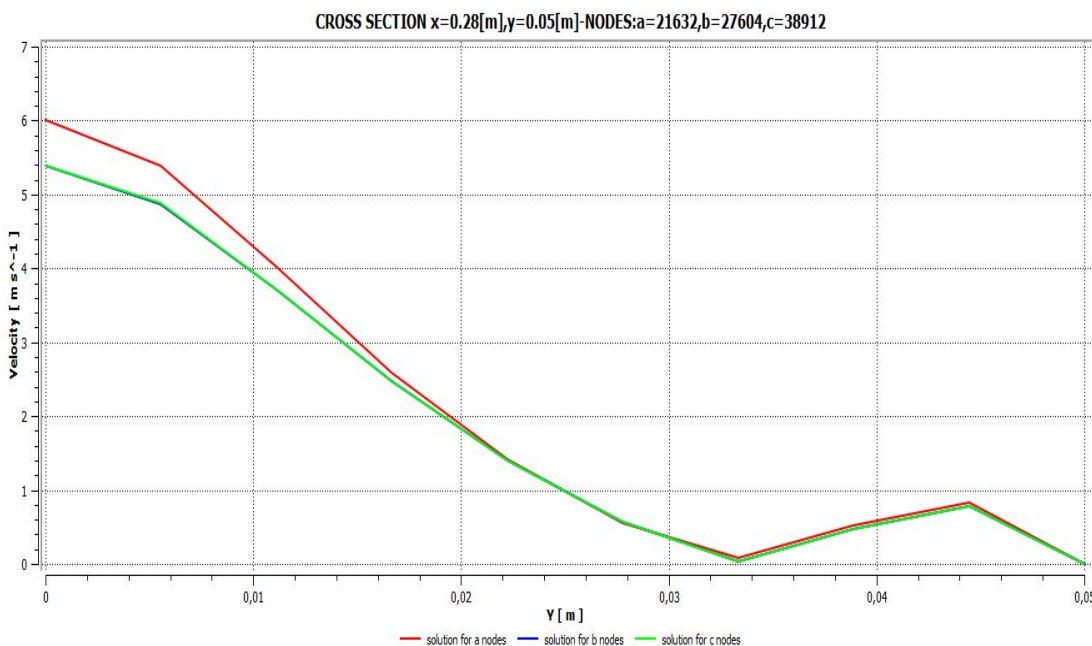
Τα προφίλ της ταχύτητας για την κάθε διατομή ξεχωριστά και όλες τις περιπτώσεις πυκνώματος των κόμβων παρουσιάζονται στην συνέχεια.

SOLUTION OF VELOCITY FOR DIFFERENT NUMBER OF NODES



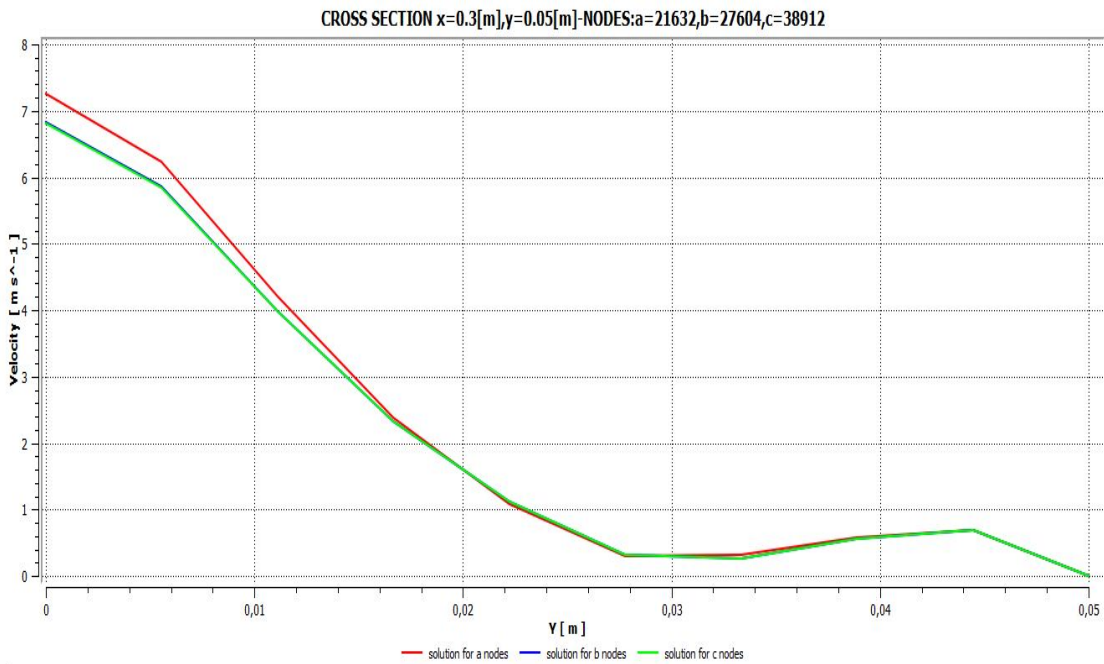
Σχ.3.4: Προφίλ ταχύτητας στην διατομή $x=0.2 [m], y=0.05[m]$ για διαφορετικό αριθμό κόμβων $a=21632$ (red line), $b=27604$ (blue line), $c=38912$ (green line).

SOLUTION OF VELOCITY FOR DIFFERENT NUMBER OF NODES



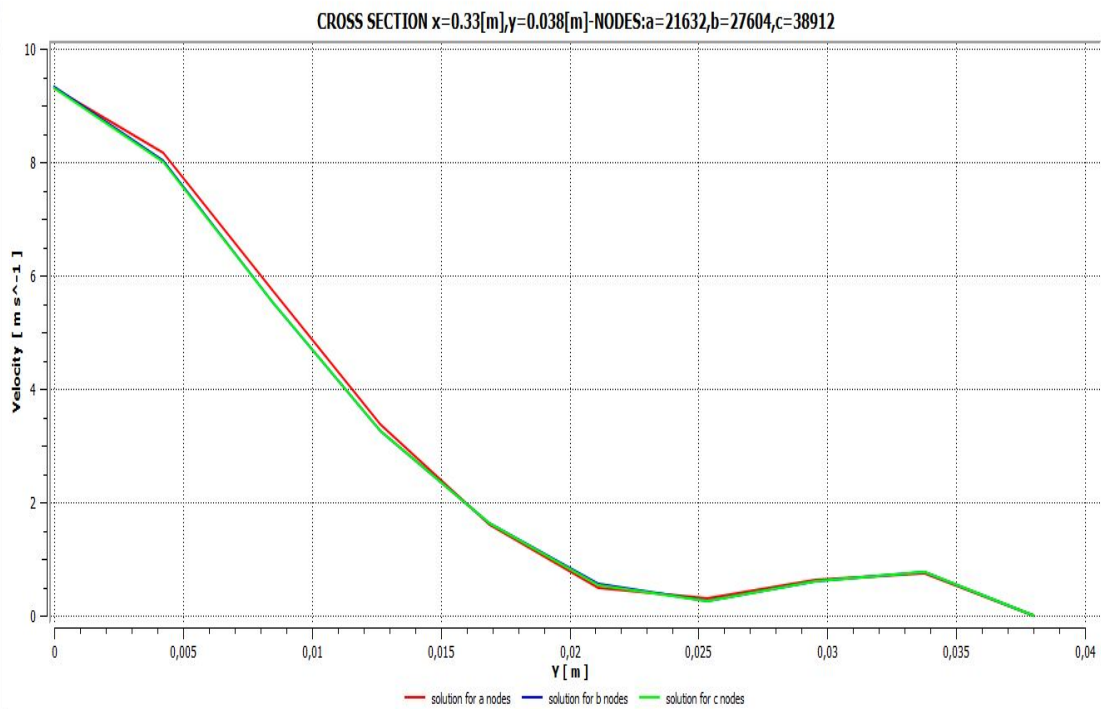
Σχ. 3.5: Προφίλ ταχύτητας στην διατομή $x=0.28 [m], y=0.05[m]$ για διαφορετικό αριθμό κόμβων $a=21632$ (red line), $b=27604$ (blue line), $c=38912$ (green line).

SOLUTION OF VELOCITY FOR DIFFERENT NUMBER OF NODES

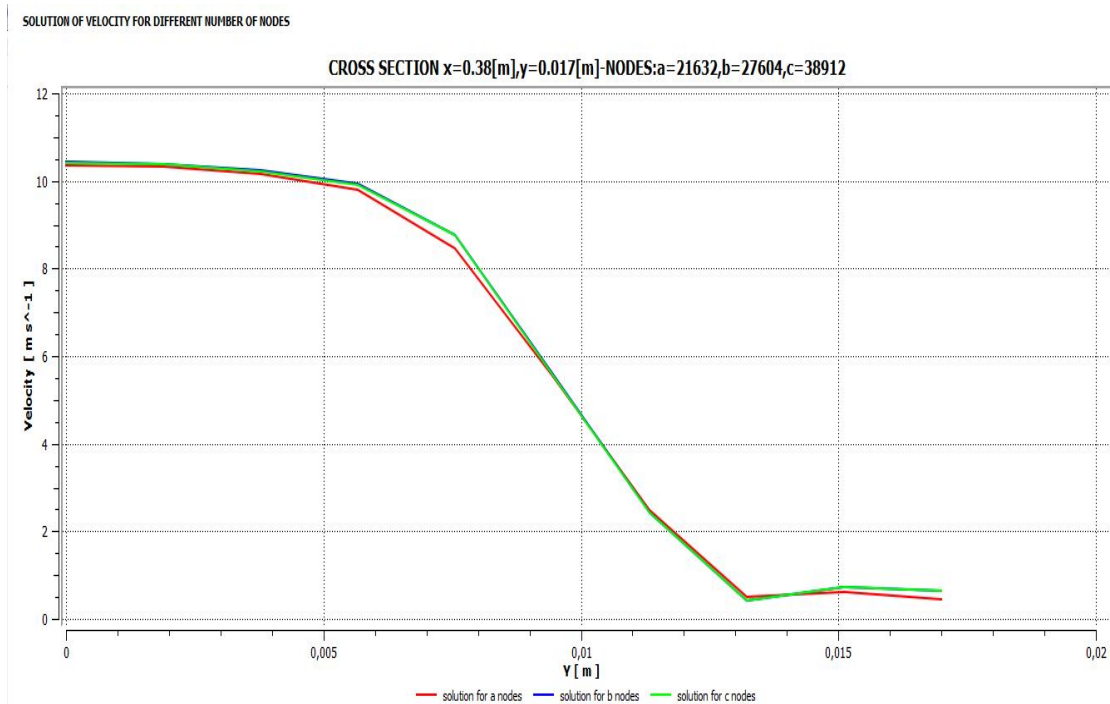


Σχ. 3.6: Προφίλ ταχύτητας στην διατομή $x=0.3 [m], y=0.05[m]$ για διαφορετικό αριθμό κόμβων $a=21632$ (red line), $b=27604$ (blue line), $c=38912$ (green line).

SOLUTION OF VELOCITY FOR DIFFERENT NUMBER OF NODES



Σχ. 3.7: Προφίλ ταχύτητας στην διατομή $x=0.38 [m], y=0.038[m]$ για διαφορετικό αριθμό κόμβων $a=21632$ (red line), $b=27604$ (blue line), $c=38912$ (green line).



Σχ. 3.8: Προφίλ ταχύτητας στην διατομή $x=0.38 [m], y=0.017[m]$ για διαφορετικό αριθμό κόμβων $a=21632$ (red line), $b=27604$ (blue line), $c=38912$ (green line).

Από τα παραπάνω διαγράμματα φαίνεται ότι για τις περιπτώσεις b και c η λύση του πεδίου της ταχύτητας δεν μεταβάλετε, το οποίο σημαίνει ότι για αριθμό κόμβων πάνω από 27604 η λύση είναι ανεξάρτητη του πλέγματος. Επομένως στις επόμενες προσομοιώσεις της παρούσης εργασίας ο αριθμός κόμβων για το 1ο πρωτότυπο του αναμορφωτή θα είναι 27604 κόμβοι.

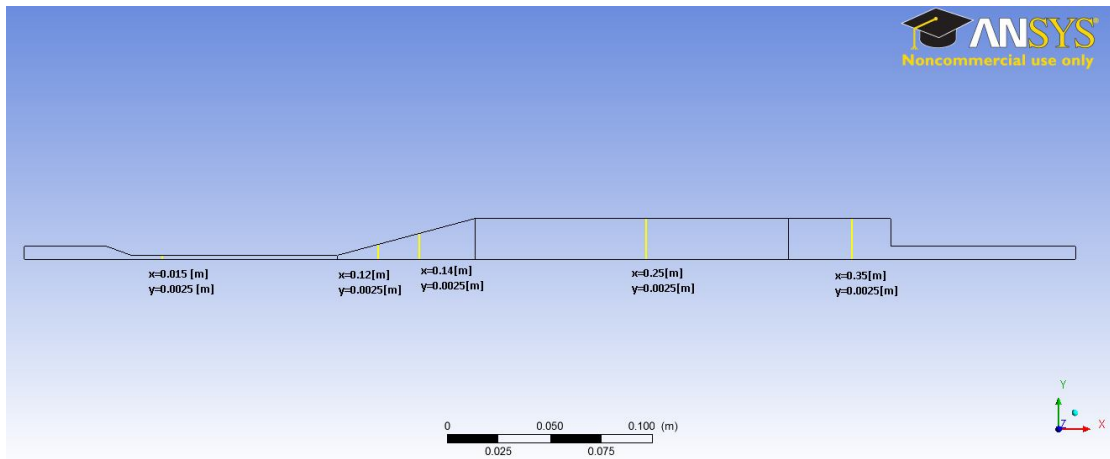
2ο πρωτότυπο τελικών προσομοιώσεων

Πέντε τρεξίματα διενεργήθηκαν για το δεύτερο πρωτότυπο. Το πύκνωμα των κόμβων του κάθε τρεξίματος παρουσιάζεται στον παρακάτω πίνακα 3.2.

Πίνακας 3.2

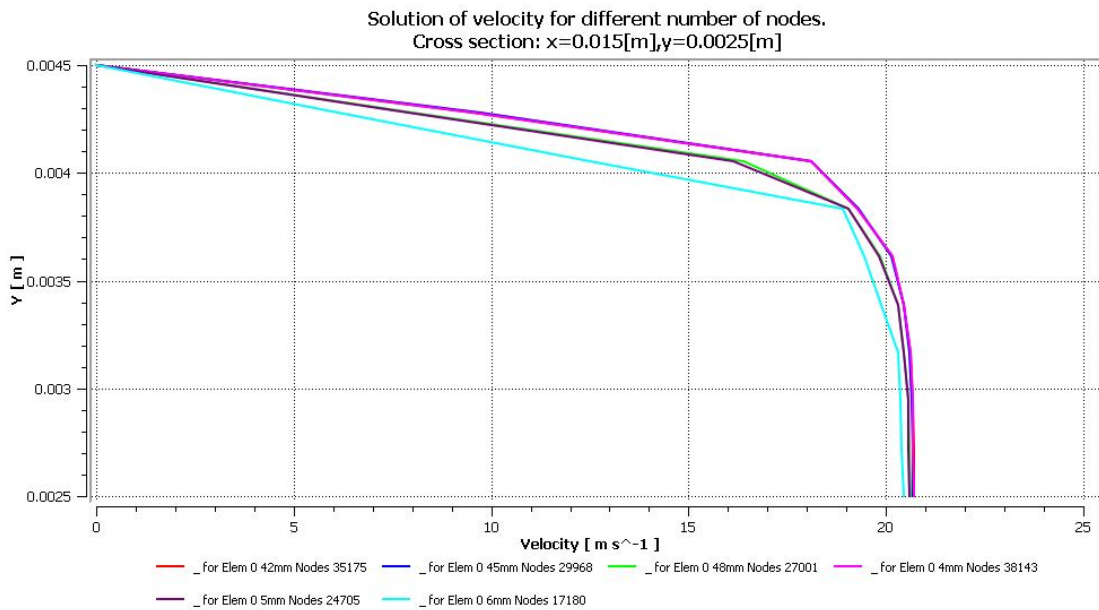
Περιπτώσεις	Μέγεθος στοιχείου [mm]	Αριθμός κόμβων
a	0.5	24705
b	0.48	27001
c	0.45	29968
d	0.42	35175
e	0.4	38143

Για την λύση της κάθε περίπτωσης παρουσιάζονται τα προφίλ ταχύτητας σε διαφορετικές διατομές του πεδίου στα σημεία που φαίνονται στο παρακάτω σχήμα 3.9.

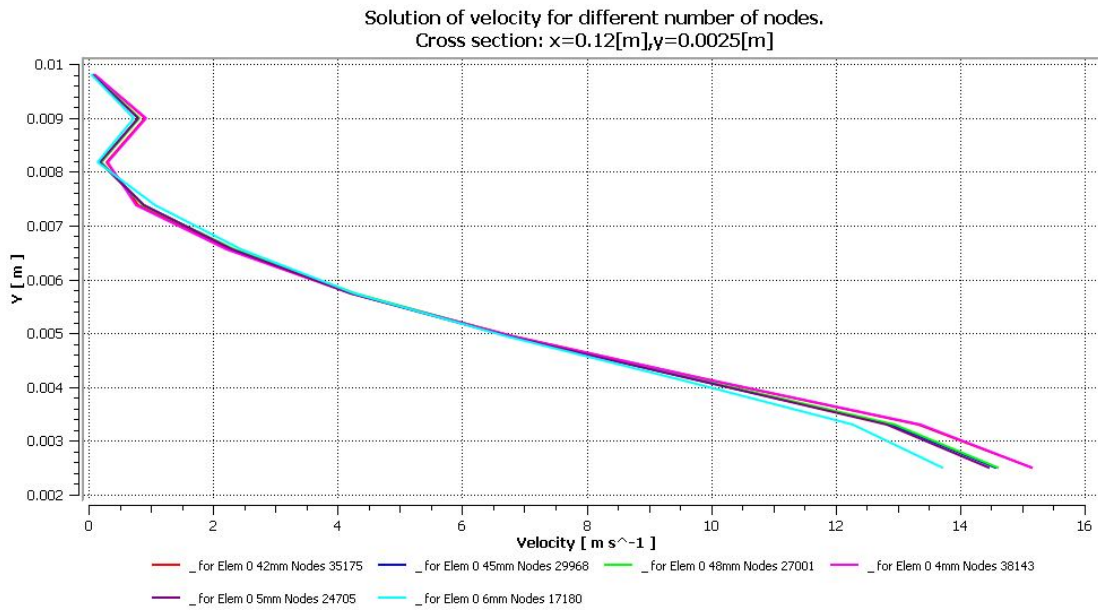


Σχ. 3.9: Διαφορετικές διατομές του πεδίου όπου τα προφίλ ταχύτητας παρουσιάζονται για διαφορετικό αριθμό κόμβων.

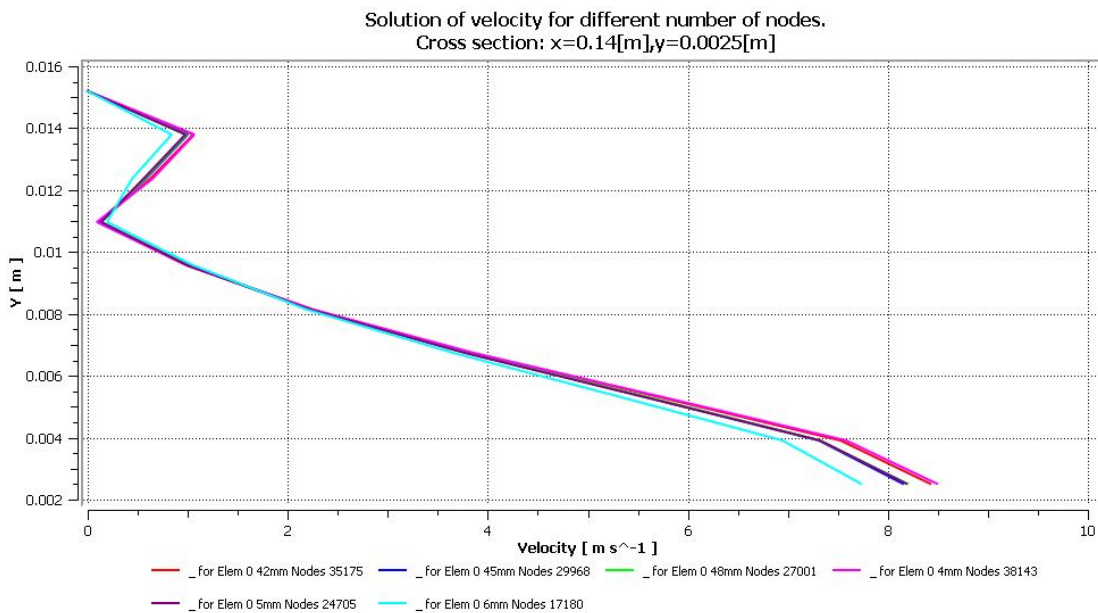
Τα διαγράμματα των προφίλ ταχύτητας στην κάθε διατομή για όλους τους διαφορετικούς αριθμούς κόμβων παρουσιάζονται παρακάτω.



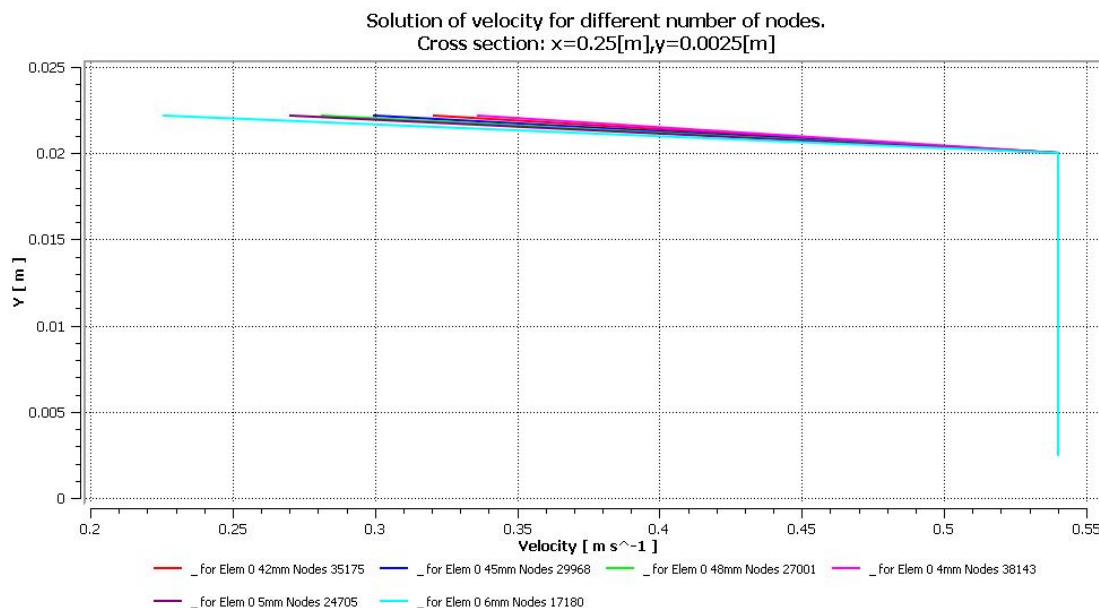
Σχ. 3.10: Προφίλ ταχύτητας στην διατομή $x=0.2 [m]$, $y=0.05[m]$ για διαφορετικό αριθμό κόμβων.



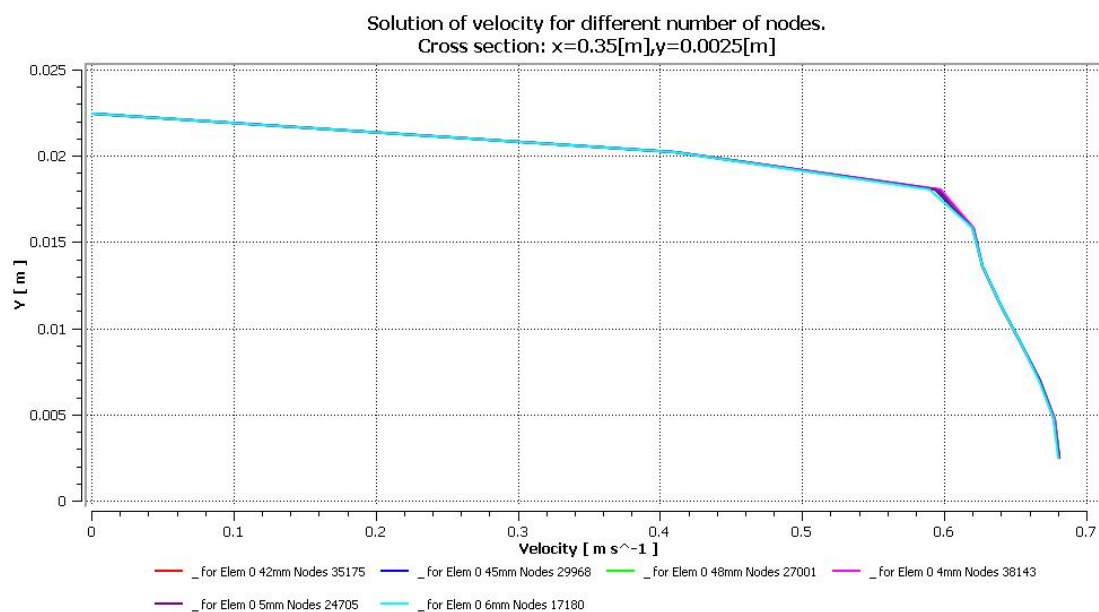
Σχ. 3.11: Προφίλ ταχύτητας στην διατομή $x=0.2 [m]$, $y=0.05[m]$ για διαφορετικό αριθμό κόμβων.



Σχ. 3.12: Προφίλ ταχύτητας στην διατομή $x=0.2 [m]$, $y=0.05[m]$ για διαφορετικό αριθμό κόμβων.



Σχ. 3.13: Προφίλ ταχύτητας στην διατομή $x=0.2 [m], y=0.05[m]$ για διαφορετικό αριθμό κόμβων.



Σχ. 3.14: Προφίλ ταχύτητας στην διατομή $x=0.2 [m], y=0.05[m]$ για διαφορετικό αριθμό κόμβων.

Από τα παραπάνω διαγράμματα φαίνεται ότι για τις περιπτώσεις πυκνώματος των κόμβων d και e, οι λύσεις της ταχύτητας δεν μεταβάλλεται, το οποίο σημαίνει ότι για αριθμό κόμβων 35175 η λύση είναι ανεξάρτητη του πλέγματος. Επομένως για της επόμενες προσομοιώσεις της παρούσης διπλωματικής εργασίας, ο αριθμός κόμβος του μοντέλου για το 2ο πρωτότυπο του αναμορφωτή θα είναι 35175 κόμβοι για μέγεθος στοιχείου 0.42 mm.

3.3 Αριθμητικές προσομοιώσεις της πρώτης προκαταρκτικής γεωμετρίας για δέσμη αέρα.

Το πρώτο πρότυπο χρησιμοποιήθηκε για προκαταρκτικές προσομοιώσεις και βασίστηκε στην γεωμετρία και τα χαρακτηριστικά της αναφοράς [7], όπως ήδη προαναφέρθηκε. Το πορώδες μέσου είναι SiSiC. Οι ιδιότητες του πορώδους μέσου αυτού του υλικού φαίνονται στον παρακάτω πίνακα 3.3.

IPM property	SiSiC porous foam
Porosity, ϕ	0.90
Extinction coef., β (m^{-1})	100
Scattering albedo, ω	0.70
Emissivity, ε	0.85
Porous structure dimension, d_p (m)	6×10^{-4}
Specific surface area, a_v (m^2/m^3)	500
C in Eq. (5)	0.137
n in Eq. (5)	1.2

Πίνακας 3.3: Ιδιότητες πορώδους SiSiC [7]

Για την προσομοίωση πορώδους μέσου στο ANSYS απαιτείται ο καθορισμός δύο κυρίως συντελεστών. Ο πρώτος είναι η ιξώδης αντίστασης ή viscous resistance R_v [$1/m^2$] που είναι το αντίστροφο της διαπερατότητας ή permeability α [m^2]. Ο δεύτερος είναι η αδρανειακή αντίσταση ή inertial resistance C_2 . Για τον υπολογισμό τους απαιτείται το χαρακτηριστικό του πορώδους που καλείτε porosity και συμβολίζεται με Φ ή ε . Η τιμές αυτών των συντελεστών πρέπει να οριστούν και προς στην x αλλά και προς την y κατεύθυνση. Στην περίπτωση μας θεωρείται ότι το SiSiC είναι ισότροπο υλικό, οπότε και προς τις δύο κατευθύνσεις ορίζεται η ίδια τιμή των συντελεστών, οι οποίοι υπολογίζονται από τις παρακάτω εξισώσεις 3.1 και 3.2.

$$\alpha = \frac{D_p^2}{150} \frac{\varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)^2} \quad \text{Eq. \{3.1\}}$$

$$C_2 = \frac{3.5}{D_p} \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon^3} \quad \text{Eq. \{3.2\}}$$

Από τον υπολογισμό προέκυψε:

viscous resistance $R_v = 5715592,14$ [$1/m^2$]

inertial resistance $R_i = 0,00124971$ [m]

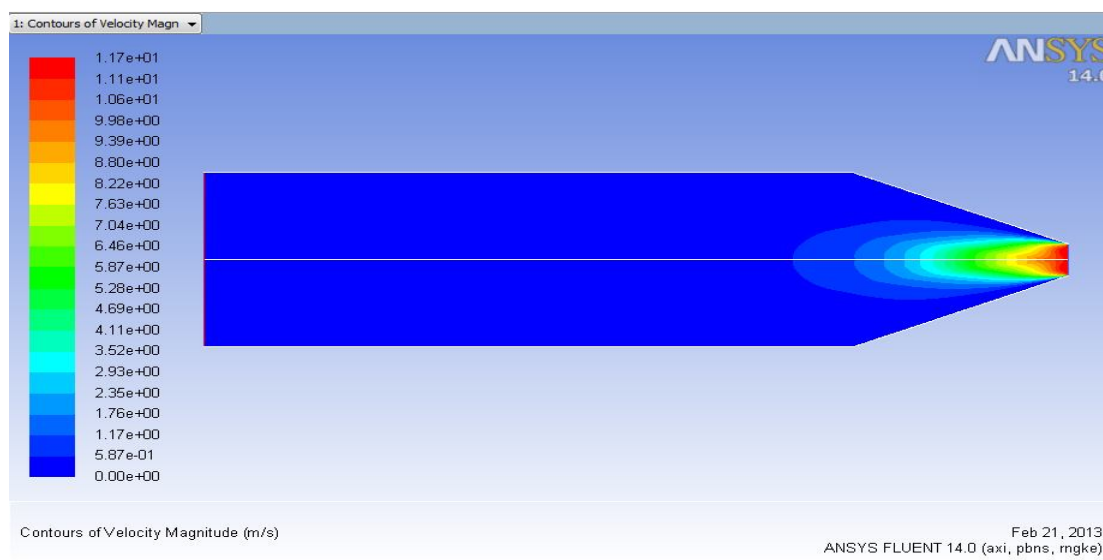
porosity ϕ or $\varepsilon = 0,9$

Επιπροσθέτως για αυτή την προσομοίωση η ταχύτητα εισόδου ήταν $U=11,7 [m/s]$, η θερμοκρασία της δέσμης του αέρα $\Theta=20[^\circ C]$, το τυρβώδες μοντέλο k-ε RNG και το κριτήριο σύγκλισης της μάζας 10^{-4} .

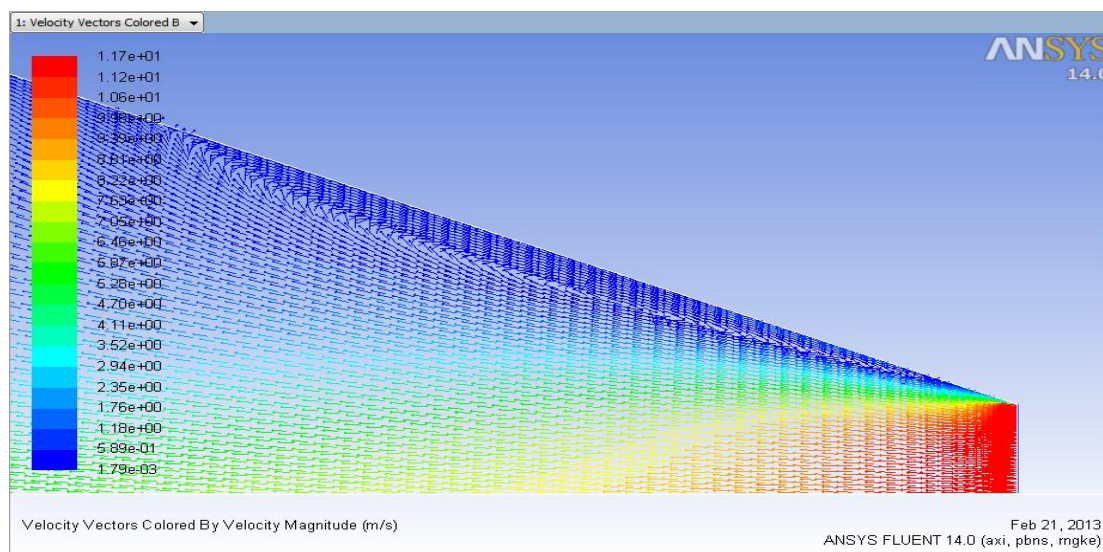
Αποτελέσματα προσομοίωση δέσμης αερά σε πορώδες υλικό για το πρώτο πρωτότυπο

Στο σχήμα 3.15 φαίνεται η διαμόρφωση του πεδίου ταχύτητας στο πορώδες πεδίο. Στο σχήμα 3.16 φαίνεται επίσης μία ανακυκλοφορία που σχηματίστηκε στο κωνικό τμήμα.

In the figure 3.15 is shown the velocity flow field and how the contour of flow is formed in the porous domain. In figure 3.16 it can be observed a recirculation which was formed in the conical domain.



Σχ. 3.15: Κατανομή ταχύτητας στο πεδίο ροής δέσμης αέρα, για χαρακτηριστικά πορώδους πεδίου για SiSiC.



Σχ. 3.16: Παρατηρούμενη ανακυκλοφορία στην είσοδο του αναμορφωτή.

3.3.1 Παραμετροποίηση του πεδίου ροής στο πορώδες μέσο.

Οι βασικές παράμετροι που φαίνονται στις εξισώσεις 3.14, 3.15 και επιδρούν στην ροή στο πορώδες μέσο είναι διάμετρος σωματιδίου του πορώδους ή diameter particulate D_p καθώς και το porosity (Φ ή ε) το οποίο ορίζεται ως ο λόγος του κενού όγκου του πορώδους προς τον συνολικό όγκο. Πρακτικά $\varepsilon=1$ σημαίνει άδειος χώρος.

Κρατώντας την μία από της παραπάνω δύο παραμέτρους σταθερή και μεταβάλλοντας την δεύτερη υπολογίζαμε του συντελεστές viscous $1/\alpha$ και inertial C_2 resistance από τις εξισώσεις 3.1 και 3.2. Έτσι προσομοιώθηκαν περιπτώσεις ροής όπου στον πρώτο κύκλο προσομοιώσεων ήταν σταθερό το D_p και μεταβλητό το ε και στο δεύτερο κύκλο προσομοιώσεων το αντίστροφο. Οι τιμές των παραμέτρων και των συντελεστών φαίνονται στους παρακάτω πίνακες.

Πίνακας 3.4

$D_p=ct.=6,00E-04$ [m]	case 1	case 2	case 3	case 4	case 5
ε	0,7	0,75	0,8	0,85	0,95
$R_v=(1/\alpha)$ [1/m ²]	1,09E+08	61728395,1	3,26E+07	1,53E+07	1,21E+06
$R_i=C_2$ [m]	0,000196	0,00028929	0,000438857	0,000702	0,00294

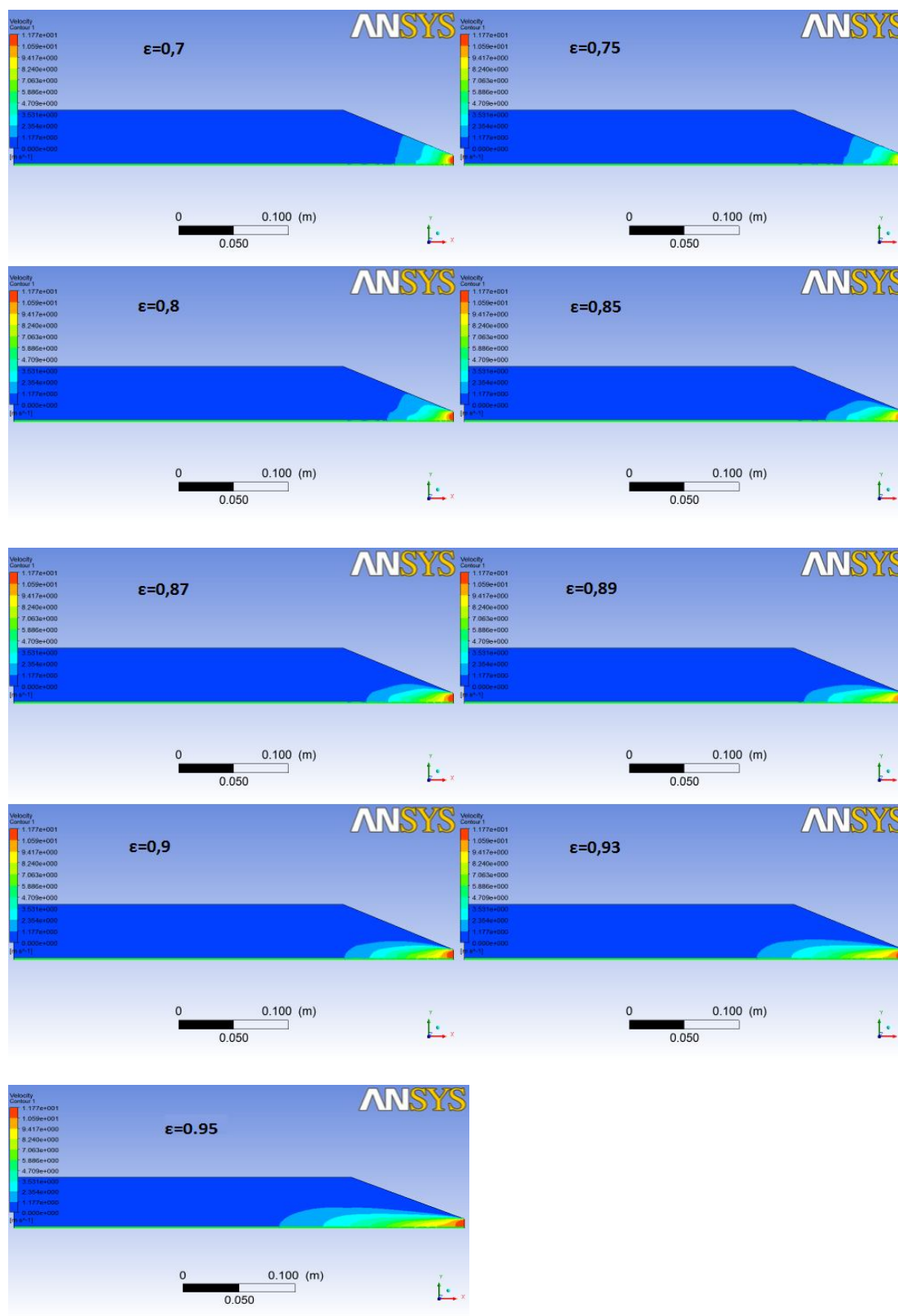
$D_p=ct.=6,00E-04$ [m]	continuity of Table 3.4			
	case 6	case 7	case 8	case 9
ε	0,93	0,87	0,88	0,89
$R_v=(1/\alpha)$ [1/m ²]	2,54E+06	1,07E+07	8,80E+06	7,15E+06
$R_i=C_2$ [m]	0,00197	0,00086836	0,000973531	0,001099

Πίνακας 3.5

$\varepsilon=ct.=0,9$	case 1	case 2	case 3	case 4	case 5
D_p [m]	5,00E-04	5,50E-04	6,50E-04	7,00E-04	8,00E-04
$R_v=(1/\alpha)$ [1/m ²]	8,23E+06	6,80E+06	4,87E+06	4,20E+06	3,22E+06
$R_i=C_2$ [m]	0,001041	0,00114557	0,001353857	0,001458	0,001666

$\varepsilon=ct.=0,9$	continuity of Table 3.5	
	case 6	case 7
D_p [m]	9,00E-04	1,00E-03
$R_v=(1/\alpha)$ [1/m ²]	2,54E+06	2,06E+06
$R_i=C_2$ [m]	0,001875	0,00208286

Τα αποτελέσματα της κατανομή της ταχύτητας στο πεδίο για $Dp=6,00E-04$ m και για διαφορετικές τιμές πορώδους ϵ φαίνονται στα παρακάτω σχήματα.



Σχ. 3.17: Κατανομή διάδοσης δέσμης αέρα σε πορώδες μέσω για διαφορετικές τιμές porosity, ταχύτητα εισόδου 11.7 [m/s] και θερμοκρασία 293,15 [K].

Ενώ τα αποτελέσματα την κατανομή ταχύτητας στο πεδίο ροής για $\varepsilon=0,9$ και διαφορετικές τιμές του particulate diameter D_p φαίνονται στα παρακάτω σχήματα:



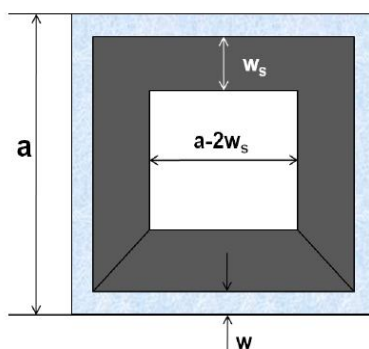
Σχ. 3.18: Κατανομή διάδοσης δέσμης αέρα σε πορώδες μέσο για διαφορετικές τιμές του medium particle diameter, ταχύτητα εισόδου 11.7 [m/s] και θερμοκρασία 293,15 [K].

Στα σχήματα 3.17 και 3.18 μπορεί να παρατηρηθεί η επίδραση του particle diameter και του porosity στο πεδίο ταχύτητας. Φαίνεται όπως αναμενόταν ότι για υψηλές τιμές του porosity μειώνεται το μήκος διάδοσης της δέσμης του αέρα ενώ για υψηλές τιμές του που σημαίνει περισσότερος άδειος χώρος, αυξάνεται. Από την άλλη πλευρά για υψηλές τιμές του particle diameter η διάδοση της δέσμης του αέρα αυξάνεται καθώς οι υψηλές τιμές του σημαίνουν περισσότερο κενό χώρο στο πεδίο.

3.4 Προσομοίωση του soot trap ως porous packed bed χρησιμοποιώντας το μοντέλο των Konstandopoulos-Johnson

3.4.1 Μοντέλο των Konstandopoulos-Johnson

Πρόκειται για ένα μοντέλο που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό της πτώσης πίεσης σε DPF φίλτρα όπως είναι το soot trap. Το μοντέλο μπορεί να προσομοιώσει καθαρά φίλτρα και να επεκταθεί φίλτρα που έχει συσσωρευτή αιθάλη όπως περιγράφεται στο [15]. Αυτό το μοντέλο θα χρησιμοποιηθεί στην παρούσα εργασία για την προσομοίωση της πτώσης πίεσης στο πεδίο του soot trap στο ANSYS. Στο σχήμα 3.19 παρουσιάζεται μία τομή ενός καναλιού του soot trap. Φαίνεται το πλάτος του καναλιού a , το πάχος του τοιχώματος w και του επικάθηντος της αιθάλης w_s .



Σχ. 3.19: Τομή καναλιού του soot trap

Η βασική εξίσωση για την πτώση πίεσης σε καθαρό φίλτρο είναι η ακόλουθη :

$$\Delta P_{clean} = \frac{\mu_{ex}}{k_o} \frac{U a}{4L} w + \frac{2 \mu F}{3a^2} UL \quad \text{Eq. \{3.3\}}$$

Όπου:

μ_{ex} : δυναμική συνεκτικότητα στην έξοδο $\left[\frac{g}{cm s}\right]$

U : είναι η ταχύτητα εισόδου $\left[\frac{cm}{s}\right]$

a : είναι το πλάτος $[cm]$

w : είναι το πάχος του τοιχώματος $[cm]$

F : είναι ένας συντελεστής ίσος με 28,454

L : είναι το μήκος καναλιού του φίλτρου $[cm]$

k_o : είναι η διαπερατότητα του καθαρού φίλτρου $[cm^2]$

Επίσης η ταχύτητα μπορεί να γραφεί ως συνάρτηση της ογκομετρικής παροχής στην έξοδο $\dot{Q}_{ex} \left[\frac{cm^3}{s}\right]$:

$$U = \frac{8 \dot{Q}_{ex}}{\pi D_f^2 \sigma a^2} \quad \text{Eq. \{3.4\}}$$

όπου:



D_f : διάμετρος του φίλτρου[cm]

σ : είναι η πυκνότητα κυψελών του φίλτρου με μονάδες $\left[\frac{1}{cm^2}\right]$, και δίνεται από,

$$\sigma = \frac{1}{(a + w)^2} \quad \text{Eq. \{3.5\}}$$

Επιπλέον ο ολικός όγκος[cm³] του φίλτρου μπορεί να υπολογιστεί από:

$$V_{trap} = \frac{\pi D_f^2 L}{4} \quad \text{Eq. \{3.6\}}$$

Επομένως η εξίσωση 3.3 μπορεί να γραφεί ως:

$$\Delta P_{clean} = \frac{\mu_{ex} \dot{Q}_{ex}}{2 V_{trap}} (a + w)^2 \left(\frac{w}{k_o a} + \frac{8 F L^2}{3 a^4} \right) \quad \text{Eq. \{3.7\}}$$

ή

$$\Delta P_{clean} = \frac{\mu_{ex} \dot{Q}_{ex}}{2 V_{trap}} (a + w)^2 \left(\frac{w}{k_o a} + \frac{4 F L^2}{3 a^4} + \frac{4 F L^2}{3 a^4} \right) \quad \text{Eq. \{3.8\}}$$

Στην εξίσωση 3.8 φαίνεται ότι ο όρος $\frac{8 F L^2}{3 a^4}$ έχει χωριστεί σε δύο επιμέρους όρους. Από φυσικής σκοπιάς ο πρώτος εκ των δύο αντιπροσωπεύει απώλειες λόγω τριβών κατα μήκος του καναλιού εισόδου ενώ ο δεύτερος του καναλιού εξόδου.

3.4.2 Προσομοίωση του soot trap ως porous packed bed στο ANSYS

Η εξίσωση του ANSYS για την πτώση πίεσης σε porous packed bed είναι η ακόλουθη:

$$\Delta P = \left(\frac{\mu_{in}}{K_{an}} U_{in} + C_2 \frac{1}{2} \rho_{in} U_{in}^2 \right) L \quad \text{Eq. \{3.9\}}$$

όπου,

μ_{in} : δυναμική συνεκτικότητα στην είσοδο του πορώδους μέσου $\left[\frac{kg}{m \cdot s}\right]$

K_{an} : διαπερατότητα[m²]

U_{in} : ταχύτητα στην είσοδο του πορώδους μέσου $\left[\frac{m}{s}\right]$

C_2 : αδρανειακή αντίσταση(inertial resistance) $\left[\frac{1}{m}\right]$

ρ_{in} : πυκνότητα στην είσοδο του πορώδους μέσου

L : μήκος του πορώδους μέσου[m]

Η ταχύτητα εισόδου μπορεί να εκφραστεί ως συνάρτηση της ογκομετρικής παροχής στην έξοδο :

$$U_{in} = \frac{\dot{Q}_{in}}{A} \quad \text{Eq. \{3.10\}}$$



$$\dot{Q}_{ex} = \frac{\rho_{in}}{\rho_{ex}} \dot{Q}_{in} \quad \text{Eq. \{3.11\}}$$

Επομένως από της εξισώσεις 3.10 ,3.11:

$$U_{in} = \frac{\rho_{ex}}{\rho_{in}} \frac{\dot{Q}_{ex}}{A} \quad \text{Eq. \{3.12\}}$$

Θέτοντας την εξίσωση 3.12 στην εξίσωση 3.9 λαμβάνουμε την παρακάτω μορφή εξίσωσης του ANSYS.

$$\Delta P = \frac{\mu_{in}}{K_{an}} \frac{\rho_{ex}}{\rho_{in}} \frac{\dot{Q}_{ex}}{A} L + C_2 \frac{1}{2} \rho_{in} \left(\frac{\rho_{ex}}{\rho_{in}} \frac{\dot{Q}_{ex}}{A} \right)^2 L \quad \text{Eq. \{3.13\}}$$

Η εξίσωση 3.7 των Konstandopoulos-Johnson model μπορεί να γραφεί με την παρακάτω μορφή:

$$\Delta P_{clean} = \frac{\mu_{ex}}{2 V_{trap}} \frac{\dot{Q}_{ex}}{(a+w)^2} \frac{w}{k_o a} + \frac{\mu_{ex}}{2 V_{trap}} \frac{\dot{Q}_{ex}}{(a+w)^2} \frac{8 F L^2}{3 a^4} \quad \text{Eq. \{3.14\}}$$

Από την σύγκριση του πρώτου όρου της εξίσωσης 3.13 με τον πρώτο όρο της εξίσωσης 3.11 καθώς επίσης και με την σύγκριση των δεύτερων όρων των ίδιων εξισώσεων, λαμβάνουμε της εξισώσεις των συντελεστών των K_{an} και C_2 οι οποίοι μπορούν να προσομοιώσουν την πτώση πίεσης στο soot trap ως porous packed bed στο ANSYS.

$$K_{an} = \frac{\mu_{in} \rho_{ex} 2 L V_{trap} K_o a}{\mu_{ex} \rho_{in} A (a+w)^2 w} \quad \text{Eq. \{3.15\}}$$

$$C_2 = \frac{\mu_{ex} \rho_{in} 16 L F A^2 (a+w)^2}{6 V_{trap} a^4 \rho_{ex}^2 \dot{Q}_{ex}} \quad \text{Eq. \{3.16\}}$$

Η ογκομετρική παροχή στην έξοδο μπορεί να υπολογιστεί από:

$$\dot{Q}_{ex} = \frac{\rho_{mix,f.c.}}{\rho_{mix,ex}} \dot{Q}_{mix,f.c} \quad \text{Eq. \{3.17\}}$$

Όπου $\rho_{mix,f.c.}$, $\dot{Q}_{mix,f.c}$ η πυκνότητα του μίγματος αέρα-μεθανίου στους flow controllers (Θερμοκρασία αναφορά 273,15[K]) και η ογκομετρική παροχή του μίγματος στους flow controllers. ρ_{in} είναι η πυκνότητα στην είσοδο του soot trap-packed bed. Γι αυτό εδó



χρειάζεται η θερμοκρασία στην είσοδο ώστε να εκτιμηθεί αυτή η ποσότητα. *is the density at the inlet of soottrap or packed bed, thus the temperature at the inlet needs in order to calculate this quantity.*

Οι συντελεστές K_{an} και C_2 μπορούν επίσης να γραφτούν ως συνάρτηση της ταχύτητας εισόδου όπως φαίνεται παρακάτω.

$$\rho_{in} = \frac{\dot{m}_{air}}{A U_{in}} \quad \text{Eq. \{3.18\}}$$

Θέτοντας την εξίσωση [3.31] στην [3.22] λαμβάνουμε την παρακάτω εξίσωση του ANSYS:

$$\Delta P = \frac{\mu_{in}}{K_{an}} \cdot U_{in} \cdot L + C_2 \cdot 0.5 \frac{\dot{m}_{air}}{A} \cdot U_{in} \cdot L \quad \text{Eq. \{3.19\}}$$

Συγκρίνοντας τους πρώτους και δεύτερους όρους των εξισώσεων 3.27 και 3.32 αναμεταξύ τους λαμβάνουμε τους συντελεστές K_{an} και C_2 ως συνάρτηση της ταχύτητας εισόδου U_{in} .

$$K_{an} = \frac{\mu_{in} U_{in} L}{\mu_{ex} Q_{ex}} \frac{2 V_{trap} K_o a}{(a+w)^2 w} \quad \text{Eq. \{3.20\}}$$

$$C_2 = \frac{2 A \mu_{ex} Q_{ex} (a+w)^2}{2 V_{trap} 3 a^4 \dot{m}_{air} U_{in} L} \frac{8 F L^2}{8 F L^2} \quad \text{Eq. \{3.21\}}$$

Σύγκριση της πτώσης πίεσης των Konstandopoulos-Johnson model με την πτώση πίεσης του soot trap ως porous packed bed στο ANSYS.

Με σκοπό την αξιολόγηση της ιδέας και των εξισώσεων της προηγούμενης παραγράφου, διενεργήσαμε προσομοιώσεις σε μία αξονοσυμμετρική ορθογωνική γεωμετρία της οποίας οι διαστάσεις είναι ίδιες με αυτές του soot trap.

Αρχικά υπολογίστηκαν οι πτώσεις πίεσης του soot trap από την εξίσωση 3.14 των Konstandopoulos-Johnson για τις περιπτώσεις ογκομετρικών παροχών που προσομοιώθηκαν. Επίσης υπολογίστηκαν οι συντελεστές K_{an} και C_2 για το porous packed bed από τις εξισώσεις 3.20 και 3.21 αντίστοιχα. Η μαθηματική επαλήθευσή της τιμής των συντελεστών εξακριβώθηκε από την εξίσωση του ANSYS 3.9 όπου η πτώση πίεσης που θα έδινε θα έπρεπε γι αυτούς τους συντελεστές να ήταν ίδια με των Konstandopoulos-Johnson της εξίσωσης 3.14.

Στον ακόλουθο πίνακα 3.6 φαίνονται οι περιπτώσεις που προσομοιώθηκαν, οι συνθήκες της είσοδο και της έξοδο του πεδίου, η πτώση πίεση που προβλέπεται από τους Konstandopoulos-Johnson, οι υπολογισμένοι συντελεστές K_{an} και C_2 και η επαλήθευση τους μέσω της εξίσωσης του ANSYS. Εν συνεχεία παρουσιάζονται με σχήματα τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων καθώς και ένα διάγραμμα σύγκρισης που τα συγκρίνει με τις προβλέψεις των Konstandopoulos-Johnson με σκοπό την αξιολόγηση.



Πίνακας 3.6

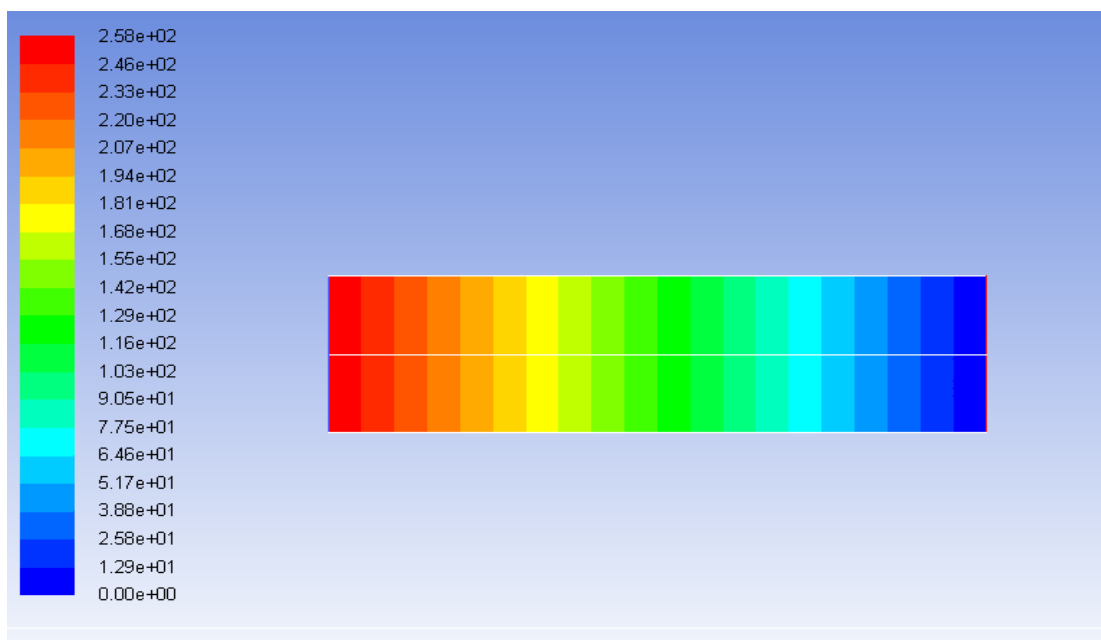
cases	Q_{air} [lt/min]	$T_{f.c}$ [K]	$\rho_{air\ f.c}$ [kg/m ³]	m_{air} [kg/s]	T_{in} [K]	ρ_{in} [kg/m ³]	Q_{in} [m ³ /s]	U_{in} [m/s]	μ_{in} [kg/m*s]
1	17	273,15	1,29213601	0,000366	773,15	0,456505	0,000802	0,638514	3,547E-05
2	27	273,15	1,29213601	0,000581	773,15	0,456505	0,0012737	1,014111	3,547E-05
3	35	273,15	1,29213601	0,000754	773,15	0,456505	0,0016511	1,314588	3,547E-05

Συνέχεια πίνακα 3.6

T_{ex} [K]	ρ_{ex} [kg/m ³]	Q_{ex} [m ³ /s]	μ_{ex} [kg/m*s]	DP [Pa] (Εξίσωση 3.27)
773,15	0,456505144	0,000801974	3,5475E-05	227,3825177
773,15	0,456505144	0,001273723	3,5475E-05	361,1369399
773,15	0,456505144	0,001651123	3,5475E-05	468,1404777

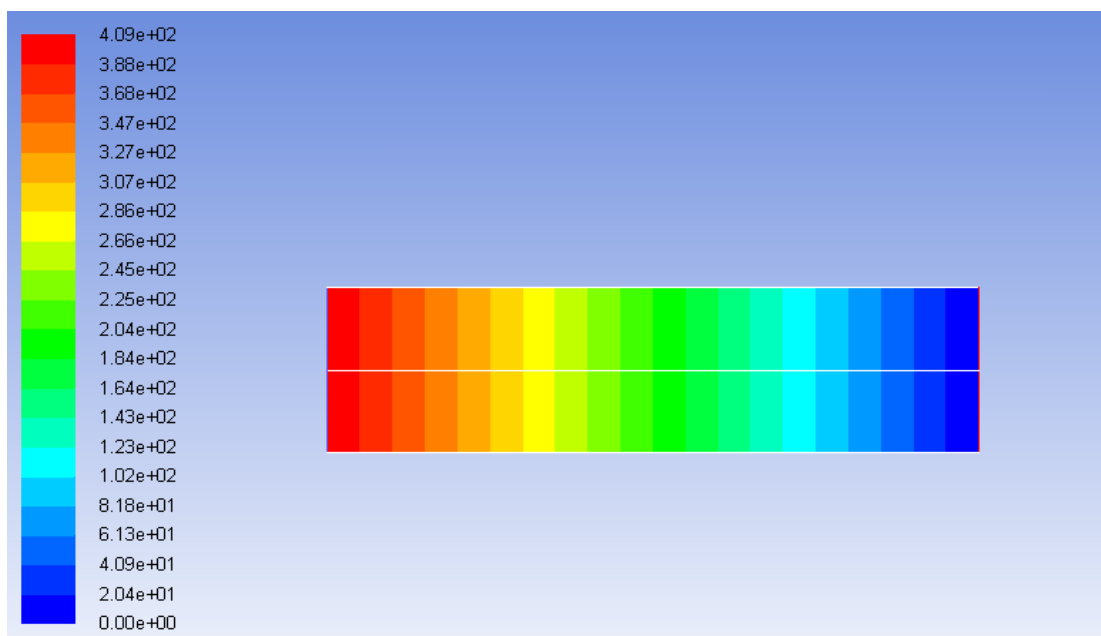
Συνέχεια πίνακα 3.6

K_{an} [m ²]	$1/K_{an}$ [1/m ²] (Εξίσωση 3.33)	C_2 [1/m] (Εξίσωση 3.34)	DP [Pa] (Εξίσωση 3.22 για επαλήθευση)
2,25645E-08	44317309,93	6692,623046	227,3825177
2,25645E-08	44317309,93	4213,87377	361,1369399
2,25645E-08	44317309,93	3250,702623	468,1404777



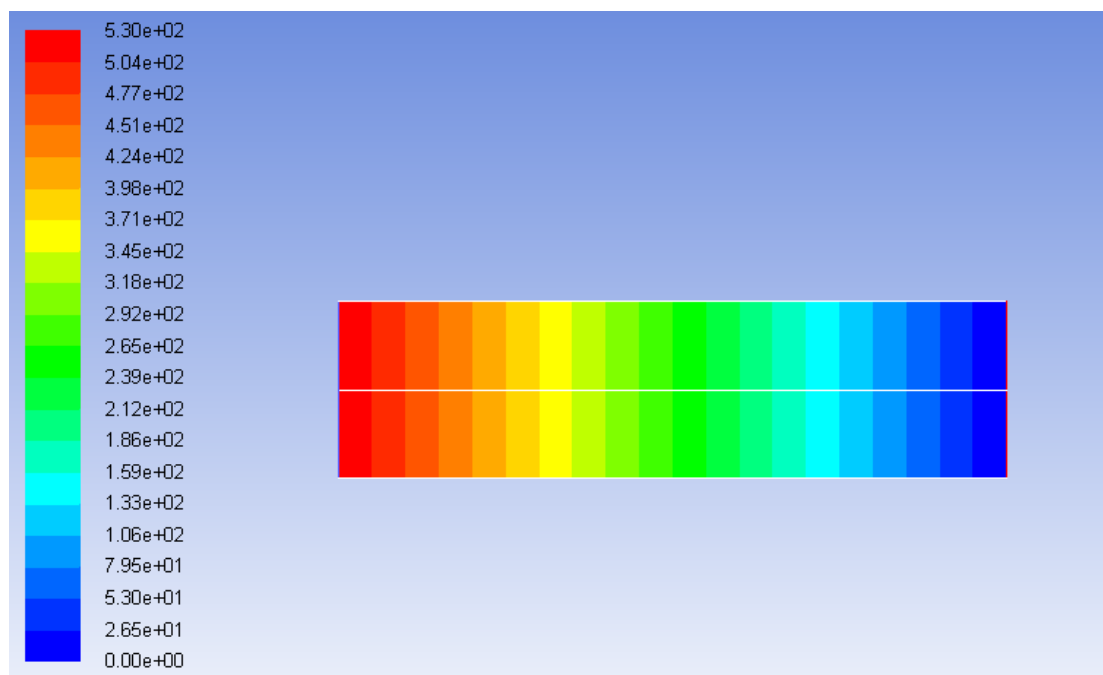
Σχ. 3.20: Πτώση πίεσης σε [Pa] για ισοθερμική (773.15 K) ροή άερα και ογκομετρική παροχή 17 [lt/min].

Πίνακας 3.7	Πτώση πίεσης [Pa]
Προσομοίωση ANSYS	258
Konstandopoulos-Johnson μοντέλο	227,38



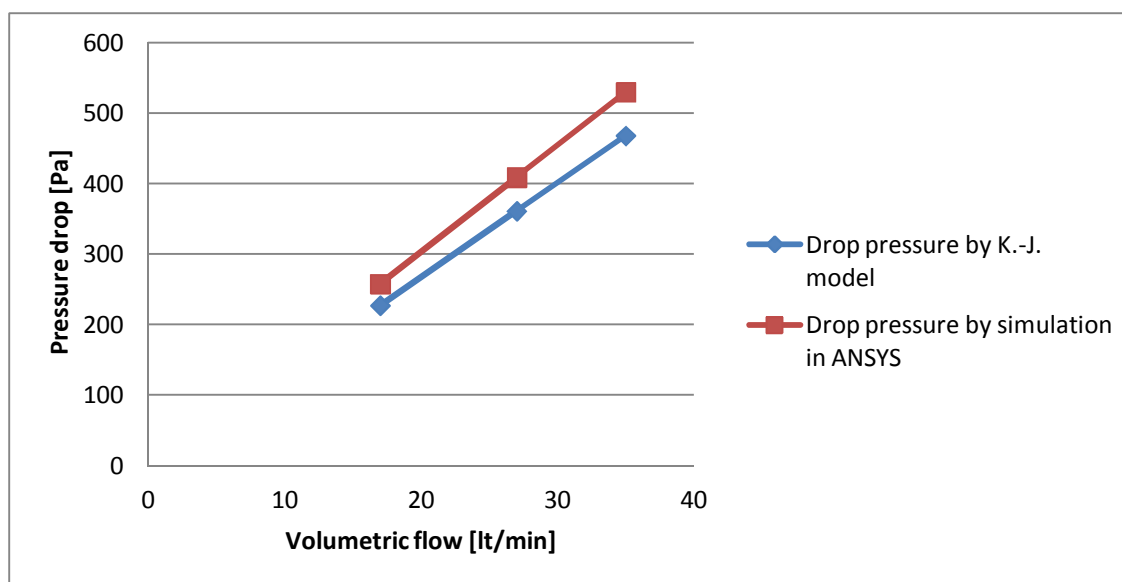
Σχ. 3.21: Πτώση πίεσης σε [Pa] για ισοθερμική (773.15 K) ροή άερα και ογκομετρική παροχή 27 [lt/min].

Πίνακας 3.8	Πτώση πίεσης [Pa]
Προσομοίωση ANSYS	409
Konstandopoulos-Johnson μοντέλο	461,14



Σχ. 3.22: Πτώση πίεσης σε [Pa] για ισοθερμική (773.15 K) ροή άερα και ογκομετρική παροχή 35 [lt/min].

Πίνακας 3.9	Πτώση πίεσης [Pa]
Προσομοίωση ANSYS	530
Konstandopoulos-Johnson μοντέλο	468,14



Σχ. 3.23: Σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων της πτώσης πίεσης του μοντέλου των Konstandopoulos-Johnson και του soot trap ως porous packed bed στο ANSYS για διαφορετικές ογκομετρικές παροχές και θερμοκρασία εισόδου 773,15 [K].



Όπως φαίνεται από τα παραπάνω σχήματα, η προσέγγισή του soot trap ως porous packed bed στο ANSYS φαίνεται να δίνει πτώση πίεση ικανοποιητικά κοντά με το μοντέλο των Kon-John. Ωστόσο φαίνεται η τάση να αποκλίνουν τα αποτελέσματα για υψηλότερες ογκομετρικές παροχές. Τα παραπάνω αποτελέσματα μας επιτρέπουν να χρησιμοποιήσουμε αυτή την προσέγγιση για το soot trap στο κεφάλαιο 5 όπου θα προσομοιωθεί η χημική κινητική. Μας δίνει επίσης το πλεονέκτημα να προσομοιώσουμε σωστά το μέτωπο της πίεσης ανάντη της ζώνης αντίδρασης, δεδομένου ότι το soot trap δεν θα μπορούσε να προσομοιωθεί με την αληθινή γεωμετρία του εφόσον το πρόβλημα είναι αξονοσυμμετρικό και η γεωμετρία του πολύπλοκη. Βέβαια η απλοποιημένη προσέγγιση υποεκτιμάει τους χρόνους παραμονής που είναι σημαντική παράμετρος για τις χημικές αντιδράσεις.

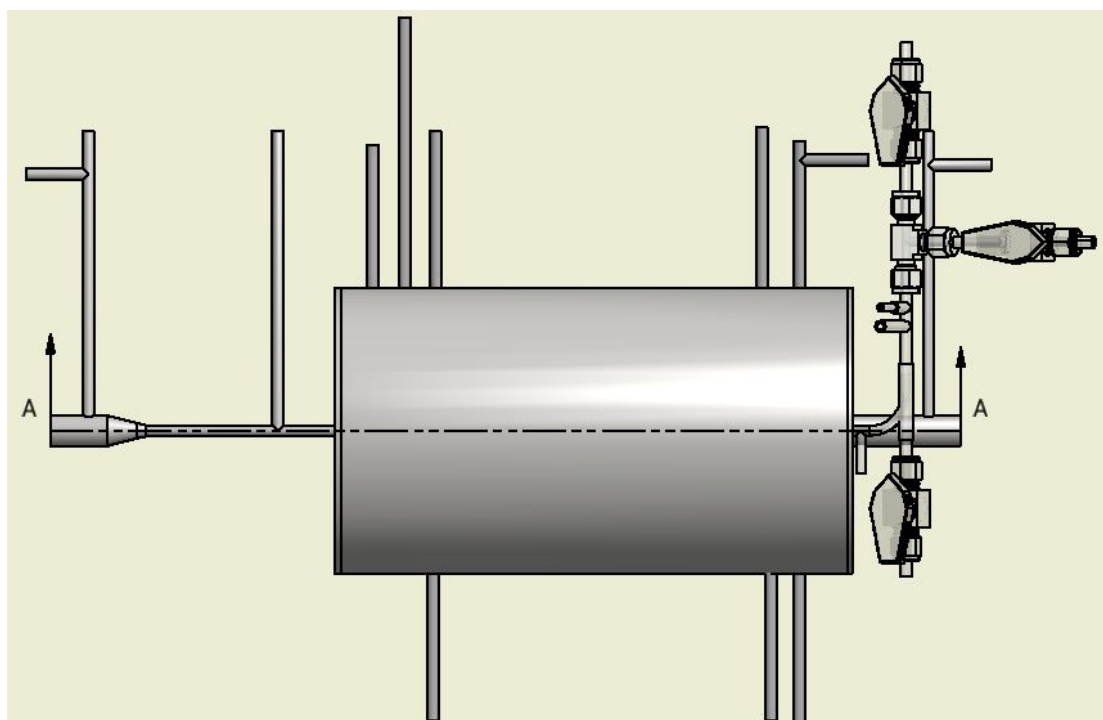
Κεφάλαιο 4^ο: Πειραματική διερεύνηση πρότυπου αναμορφωτή καυσίμου

4.1 T-POX αναμορφωτής βασισμένος σε wall flow filter

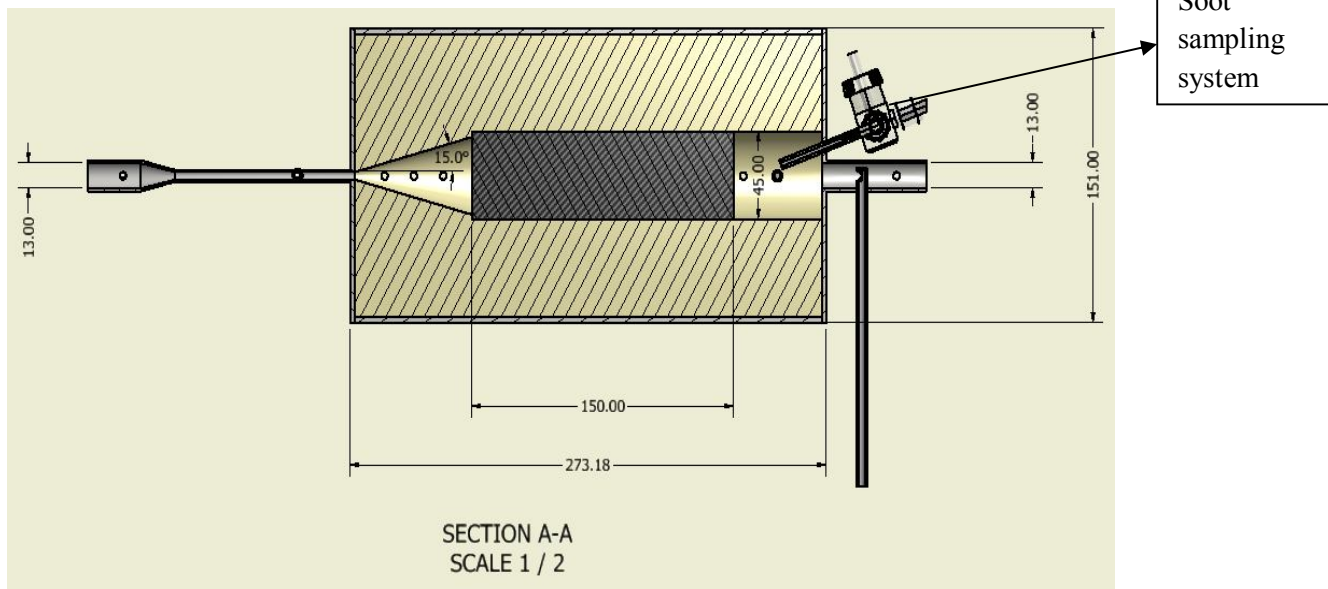
Ο κύριος σκοπός της πειραματικής διερεύνησης είναι η αξιολόγηση ενός πρότυπου αναμορφωτή καυσίμου διεργασίας θερμική μερικής οξειδωσης (T-POX) με προσαρμοσμένο εντός του ένα wall flow filter ή όπως διαφορετικά καλείται soot trap. Η αξιολόγηση θα γίνει ως προς τα λειτουργικά χαρακτηριστικά, την αποδοτικότητα και την δυνατότητα αναγέννηση σε χαμηλούς λόγους ισοδυναμίας αέρα όπως ήδη έχει αναφερθεί στην παράγραφο 2.5.

4.1.1 Το σχέδιο και η κατασκευή του T-POX αναμορφωτή

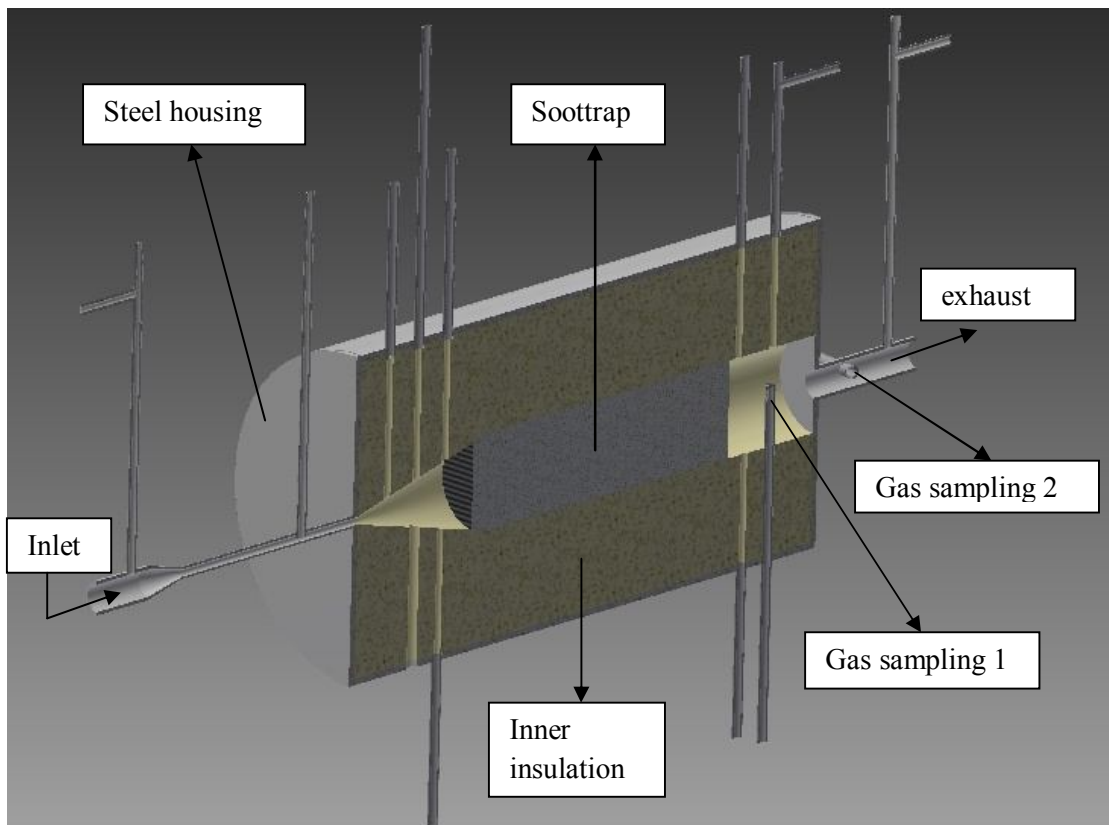
Το ίδιο σχέδιο του T-POX κατασκευάστηκε δύο φορές καθώς διενεργήθηκαν δύο στάδια πειραματικής διερεύνησης. Τα λειτουργικά χαρακτηριστικά και οι συνθήκες λειτουργίας ήταν αυτά που διερευνήθηκαν κατά το πρώτο στάδιο της πειραματικής διερεύνησης ενός κατά το δεύτερο στάδιο ενσωματώθηκε την αρχική διάταξη και ένα σύστημα μέτρησης αιθάλης. Το σχέδιο του αναμορφωτή της δεύτερης έκδοσης στον οποίο φαίνεται αυτό το σύστημα δειγματοληψίας καθώς και τα σωληνάκια των θερμοστοιχείων, παρουσιάζεται παρακάτω:



Σχ.4.1 Σχηματική αναπαράσταση αναμορφωτή (δεύτερη έκδοση).



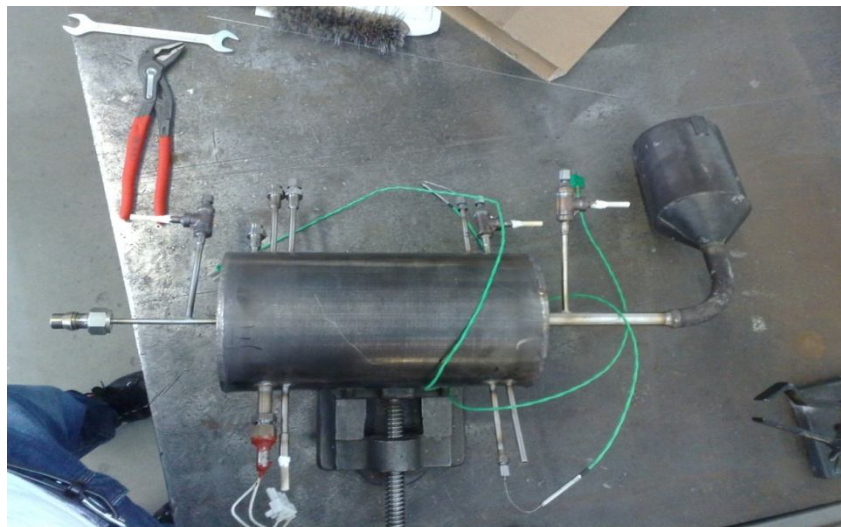
Σχ.4.2 Σχηματική αναπαράσταση της τομής του TPOX αναμορφωτή με wall flow filter (δεύτερη έκδοση)



Σχ.4.3 Μία 3D σχηματική αναπαράσταση της τομής του TPOX αναμορφωτή με wall flow filter

Ο αναμορφωτής καύσιμου σχεδιάστηκε με στόχο να έχει μία σταθερή TPOX διεργασία. Η γεωμετρία του αποτελείται από δύο τμήματα, ένα κωνικό το οποίο καθιστά ικανό το μέτωπο της φλόγας να αντορυθμίζεται ως προς την θέση του, σύμφωνα με τις συνθήκες λειτουργίας

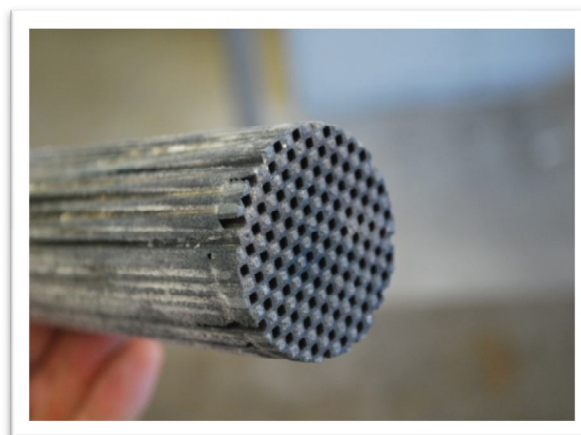
και ένα κυλινδρικό κομμάτι όπου αργές ενδόθερμες αντιδράσεις λαμβάνουν χώρα στο soot trap καθώς και ανάντη. Επίσης επιλέχθηκε μία μικρής διαμέτρου σωλήνα για την είσοδο των αντιδρώντων, στοχεύοντας με αυτών τον τρόπο στην αύξηση της ορμής τους ώστε να αποτραπεί πιθανότητα πισωγυρίσματος της φλόγας (flash back), δεδομένου ότι οι ταχύτητες των πειραμάτων θα ήταν χαμηλές λόγω χαμηλών θερμικών ισχύων που θα δοκιμάζονταν εξαιτίας του μικρού μεγέθους του αναμορφωτή. Στο παραπάνω σχήμα η γεωμετρία της τομής του αναμορφωτή, η γεωμετρία του εσωτερικού του soot trap δεν αναπαριστάτε όπως είναι στην πραγματικότητα.



Σχ.4.4 TPOX αναμορφωτής (πρώτη έκδοση) συγκολλημένος με τον μετακαύτη κατά την διάρκεια της κατασκευής.



Σχ.4.5 Το wall flow filter ή soot trap από κεραμικό υλικό SiSiC.



Σχ.4.6 Το wall flow filter μετά από διεργασία κοπής για την ενσωμάτωση στον αναμορφωτή.

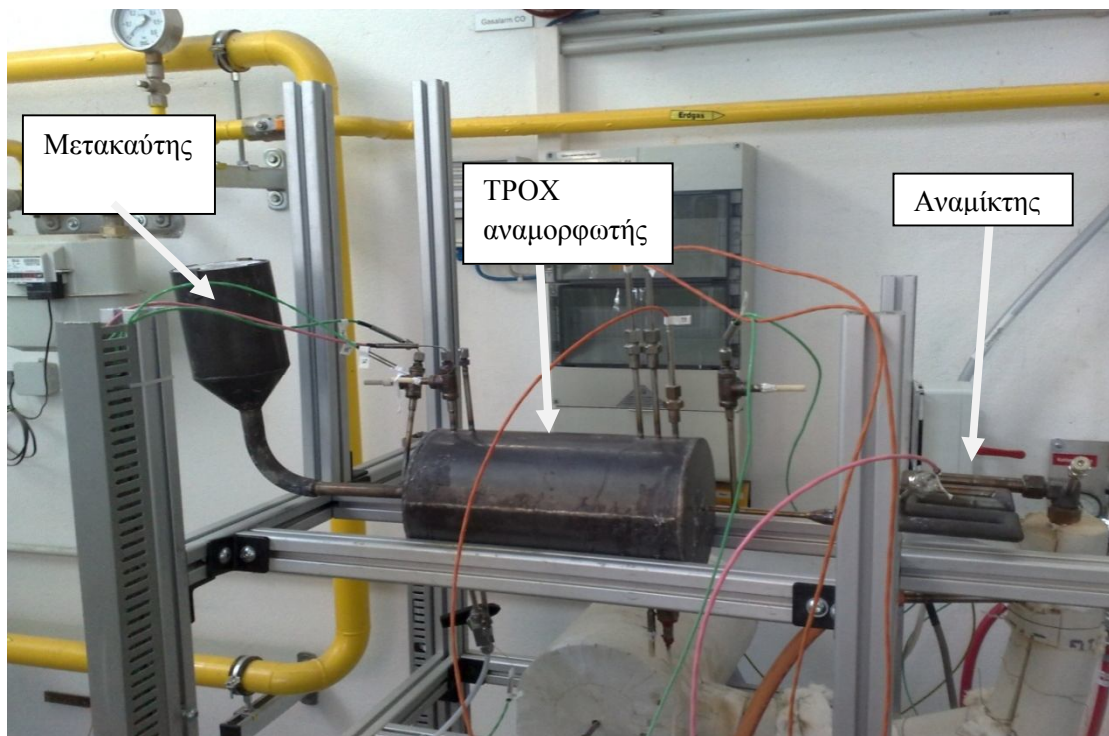
Στον σχήμα 4.6 φαίνεται το wall flow filter ή soot trap που ενσωματώθηκε στον T-POX αναμορφωτή και η αρχική μήτρα από την οποία προήλθε είναι ένα soot trap μεγαλύτερου μεγέθους το οποίο φαίνεται στο σχήμα 4.5. Τα χαρακτηριστικά αυτού του κεραμικού φίλτρου παρουσιάζονται στους παρακάτω πίνακες 4.1 και 4.2.

Property	SiC
Material density (kg/m^3)	3080
Porosity (%)	42
Cell size (mm)	1.49×1.49
Wall thickness (mm)	0.4
Wall density (kg/m^3)	1800
Mean pore size (μm)	9
Permeability (m^2)	3.7×10^{-13}

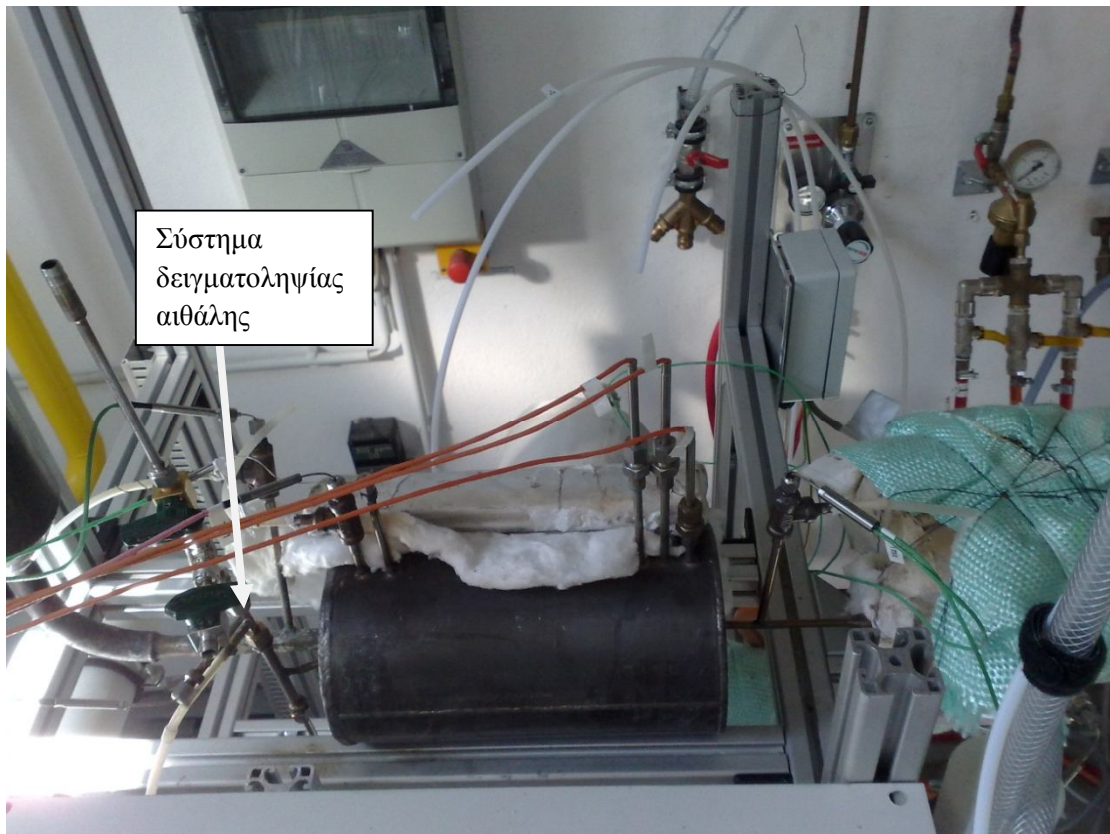
Πίνακας 4.1. Ιδιότητες ενός απλού καναλιού του wall flow filter. Η διαπερατότητα εδώ αναφέρεται ως Ko.

Type	SiC 14/200
Diameter	143.8 mm
Length	152.4 mm
Cell concentration	200 cells/in ²
Cell pitch	1.89 mm
Wall thickness	0.4 mm

Πίνακας 4.2. Χαρακτηρίστηκα του wall flow filter .



Σχ.4.7. TPOX αναμορφωτής (πρώτη έκδοση) χωρίς μόνωση.



Σχ.4.8 Κατά την διάρκεια προετοιμασίας της μόνωση του TPOX αναμορφωτή (δεύτερη έκδοση) με το προσαρμοσμένο σύστημα δειματοληψίας αιθάλης και τα προσαρμοσμένα θερμοζεύγη.



Σχ.4.9 Ο T-POX αναμορφωτής (πρώτη έκδοση) μονωμένος με τα κύρια στρώματα μόνωσης.



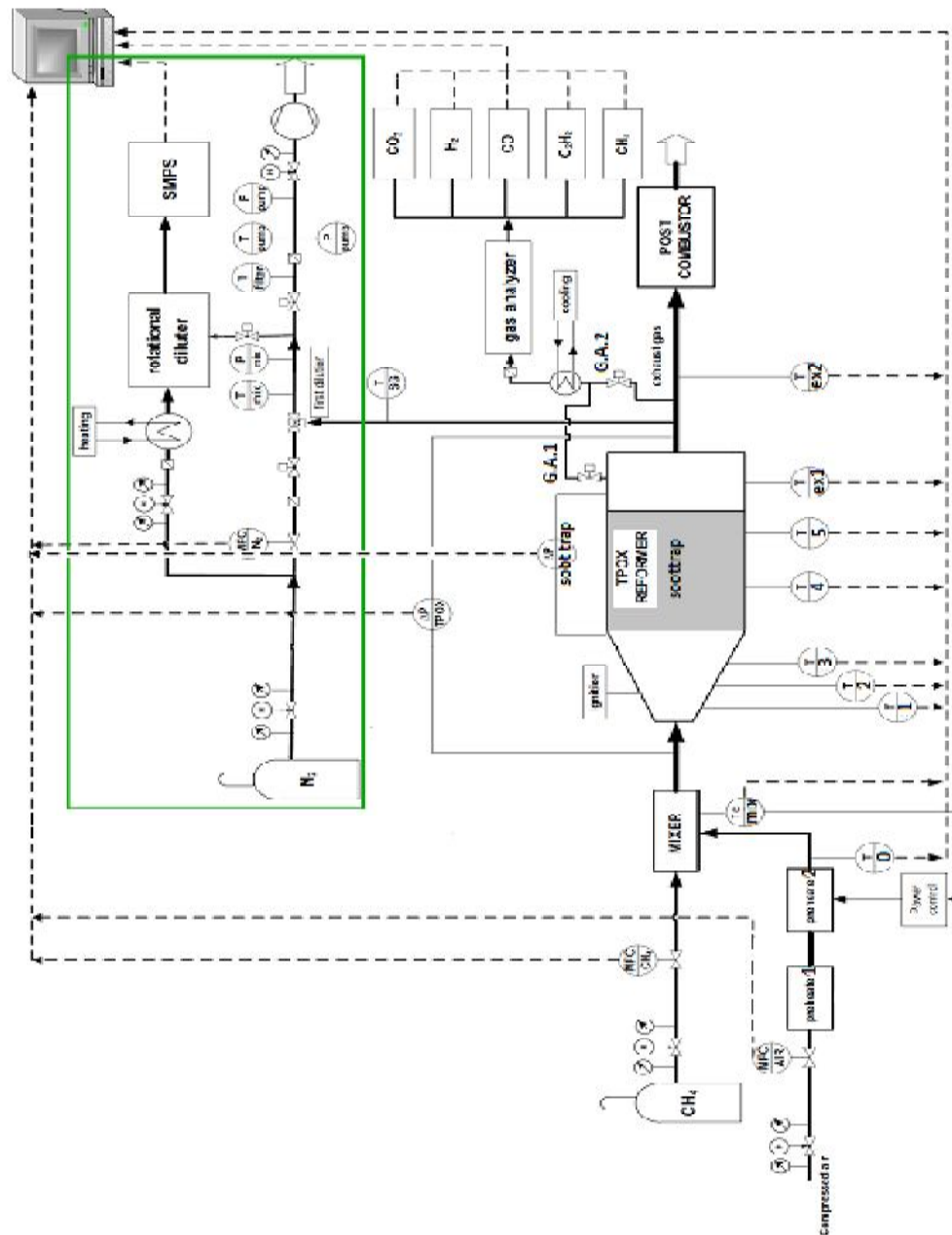
Σχ.4.10 Ο T-POX αναμορφωτής (πρώτη έκδοση) με την τελική μόνωση.



Σχ.4.11 Η τελική συνδεσμολογία (δεύτερη έκδοση) με το thermodiluter head του dilution system αναγκαίο για τις μετρήσεις της αιθάλης.

4.2 Η πειραματική διάταξη

Η πειραματική διάταξη στην οποία διενεργήθηκαν οι πειραματικές διερευνήσεις παρουσιάζεται στο παρακάτω σχηματικό διάγραμμα 4.12. Φαίνεται εκτός των σημείων δειγματοληψίας του καυσαερίου, και το σύστημα δειγματοληψίας και αραίωσης του καυσαερίου, με σκοπό την μέτρηση των σωματιδίων αιθάλης στο SMPS. Επιπλέον φαίνονται οι δύο προθερμαντήρες του αέρα. Ο πρώτος ανέβαζε το θερμοκρασιακό επίπεδο του αέρα στην επιθυμητή τιμή και ο δεύτερο έχοντας έναν controller και σε συνδυασμό με την ανάδραση του θερμοζεύγους T_{mix} ρύθμιζε ανοιγοκλείνοντας να διατηρείται η θερμοκρασία σταθερή.



Σχηματικό διάγραμμα.4.12 .Αναπαράσταση της πειραματικής διάταξης

4.2.1 Μετρήσεις αιθάλης

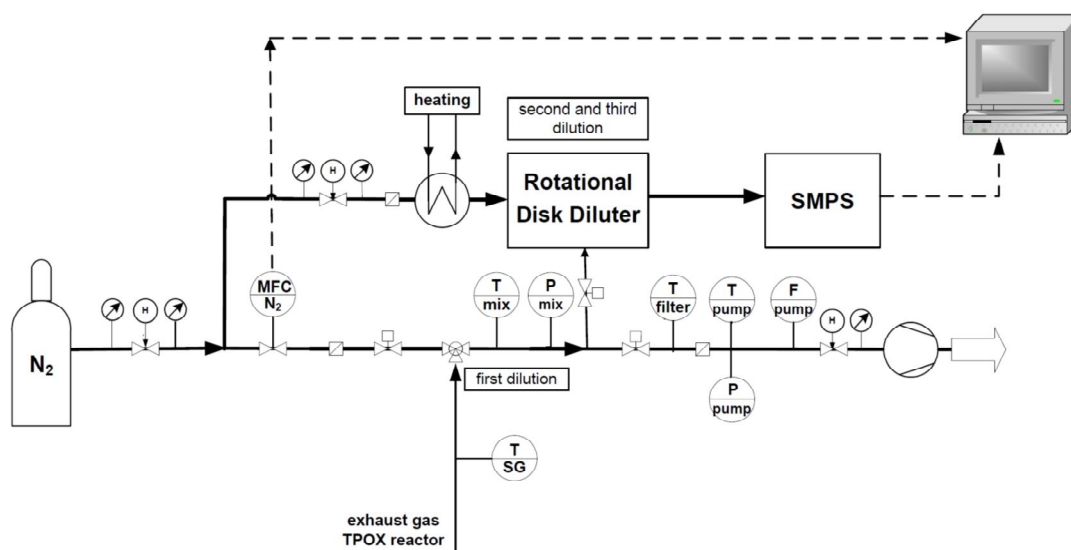
Προκειμένου πάρουμε αξιόπιστες κατανομές αιθάλης έπρεπε η δειγματοληψία και οι συνθήκες του δείγματος καυσαερίου να είναι κατάλληλες. Μία από τις βασικές ενέργειες που πρέπει να γίνουν, είναι η αραίωση ή διάλυση dilution του δείγματος. Αυτή η αραίωση γίνεται με άζωτο. Στην συνέχεια το δείγμα πηγαίνει στην συσκευή Scanning Mobility Particle Sizer (SMPS) όπου μετρούνται το μέγεθος των σωματιδίων και παίρνουμε τις κατανομές των μεγεθών.



Fig.4.13 Το σύστημα του SMPS στο οποίο διενεργήθηκαν οι μετρήσεις της αιθάλης αυτής της μελέτης, στο εργαστήριο του Technical University Bergakademie of Freiberg της Γερμανίας.

4.3 Το σύστημα αραίωσης του δείγματος

Όπως ειπώθηκε προηγουμένως, η δειγματοληψία από τον TPOX αναμορφωτή, απαιτεί να σχεδιαστεί ένα κατάλληλο σύστημα δειγματοληψίας και αραίωσης του δείγματος ώστε η κατανομές μεγεθών των σωματιδίων που θα προκύψουν από το SMPS να είναι αξιόπιστες. Λαμβάνοντας υπόψη του γεωμετρικούς περιορισμούς, τα χαρακτηριστικά της διαδικασίας του συγκεκριμένου αναμορφωτή φτιάχτηκε ένα σύστημα αραίωσης τριών σταδίων με στόχων να πετύχει αραίωση μεγαλύτερη του $>10^4$. Η μέγιστη θερμοκρασία που μπορούσε να δεχτεί ο diluter head ήταν 200°C , αλλά το δείγμα κατά την συλλογή του είχε μία θερμοκρασία περί 800°C . Γι αυτό το λόγο μια πρώτη αραίωση έπρεπε να γίνει πριν το thermodiluter head. Επίσης η σκοπιμότητα της πρώιμης αραίωσης καθώς γενικότερα και του συστήματος αραίωσης-διάλυσης, ήταν να επιβραδυνθεί η χημική κινητική των αντιδράσεων μετά την θέση δειγματοληψίας, επίσης να ελαχιστοποιηθούν απώλειες σωματιδίων προς στα τοιχώματα καθώς επίσης και η δημιουργία συσσωματωμάτων τους. Το σύστημα διάλυσης-αραίωσης παρουσιάζεται στο παρακάτω σχηματικό διάγραμμα 4.14.



Σχηματικό διάγραμμα.4.14: Ο εξοπλισμός μέτρησης της αιθάλης με το σύστημα δειγματοληψίας και αραίωσης.



4.4 Πειραματική διαδικασία και οι διερευνηθείσες περιπτώσεις

Κατά το ξεκίνημα του πειράματος, ο αέρας προθερμαινόταν και εν συνεχεία αναμιγνυόταν με το μεθάνιο στον αναμίκτη πριν τον αναμορφωτή μέχρι ως ότου η θερμοκρασία του μίγματος να φτάσει του 400°C που ήταν η θερμοκρασία των αντιδρώντων για όλες της διερευνηθείσες περιπτώσεις.

Μετά την προθέρμανση πραγματοποιούταν ανάφλεξη του μίγματος για σχετικά υψηλό λόγο ισοδυναμίας αέρα ($\lambda=0.7$) εντός του κωνικού τμήματος. Στην συνέχεια η προς διερεύνηση περιπτώσεις από άποψη θερμικής ισχύος και λόγου ισοδυναμίας αέρα θέτονταν στο σύστημα, διατηρώντας σταθερή την θερμοκρασία προθέρμανσης και περιμένοντας επαρκεί χρόνο για την σταθεροποίηση των συνθηκών από την μία περίπτωση στην άλλη πριν καταγράψουμε οποιαδήποτε μέτρηση.

Η λειτουργική συμπεριφορά του αναμορφωτή ελέγχθηκε μεταβάλλοντας τον λόγο ισοδυναμίας αέρα σε ένα εύρος από $\lambda=0.4$ και πάνω $\lambda=0.5$ και σε ένα εύρος θερμικής ισχύος από 1 kW μέχρι 4 kW.

Για όλες τις διερευνηθείσες περιπτώσεις καταγράφηκαν η χημική σύνθεση του καυσαερίου, τα θερμοκρασιακά προφίλ και για κάποιες επιλεγμένες περιπτώσεις κατεγράφησαν οι κατανομές μεγέθους των σωματιδίων αιθάλης. Για τις μέτρησης της αιθάλης η θερμική ισχύς ήταν 1.5 kW και ο λόγος ισοδυναμίας αέρα ξεκίνησε από 0,5 και μειώθηκε σταδιακά σε 0,46 και 0,42 όπου η αιθάλη εμφανίστηκε. Στην συνέχεια ο λόγος ισοδυναμίας αέρα αυξήθηκε πάλι σε 0,5 και 0,6. Το δείγμα εξετάζονταν από το SMPS για διάστημα 90sec. Ο μέσο όρος δέκα τέτοιων δειγμάτων έδινε την τελική κατανομή της κάθε περίπτωσης.

Με σκοπό την μέτρηση των συγκεντρώσεων των χημικών ενώσεων H_2 , CO , CO_2 , CH_4 και C_2H_2 στα καυσαέρια, το δείγμα έπρεπε να ψυχθεί γρήγορα στους 180°C και να μεταφερθεί στο Gas Analyzer. Όλο το περιεχόμενο νερό των καυσαερίων έπρεπε προηγουμένως να συμπυκνωθεί, επομένως ο Gas Analyzer έδινε τα κλάσματα όγκου του ξηρού μίγματος. Η ποσότητα του νερού που κατακρατήθηκε, υπολογίστηκε στην συνέχεια από την ισορροπία μάζας του οξυγόνου.

Αναφορικά με το σύστημα μέτρησης της αιθάλης η θερμοκρασία του thermodiluter head ήταν 150°C. Το άζωτο ως το μέσω διάλυσης είχε τεθεί η τροφοδοσία στα 21 NI/min. Επίσης χρησιμοποιήθηκε μία αντλία με σκοπό να οδηγηθεί το άζωτο μέσα από τα σωληνάκια που θέλαμε και να επιτύχουμε ανάμιξη με το καυσαέριο. Μόλις η θερμοκρασία του μίγματος αζώτου καυσαερίου έφτασε σε σταθερές τιμές, το SMPS ξεκινούσε την διαδικασία μετρήσεων.

**Οι διερευνηθείσες περιπτώσεις. Θερμική ισχύς/Λόγος ισοδυναμίας αέρα /Παροχές/Θερμοκρασίες**

Πίνακας 4.3. Πρώτος κύκλος πειραμάτων αναμορφωτή

Περίπτωση	N [kW]	λ	mch4 [kg/s]	mair [kg/s]	mmix [kg/s]	Qair [lt/min]	Q ch4[lt/min]	Tmix [°C]
1	2	0,5	3,996E-05	0,000343	0,00038296	15,927	3,359	403
2	2	0,45	3,996E-05	0,000309	0,00034866	14,334	3,359	401
3	2	0,4	3,996E-05	0,000274	0,00031436	12,742	3,359	400
4	1,5	0,45	2,997E-05	0,000232	0,00026149	10,751	2,519	392
5	1,5	0,5	2,997E-05	0,000257	0,00028722	11,945	2,519	392
6	1,5	0,52	2,997E-05	0,000268	0,00029751	12,423	2,519	393
7	1,5	0,4	2,997E-05	0,000206	0,00023577	9,556	2,519	410,42
8	1,5	0,42	2,997E-05	0,000216	0,00024606	10,034	2,519	398,5

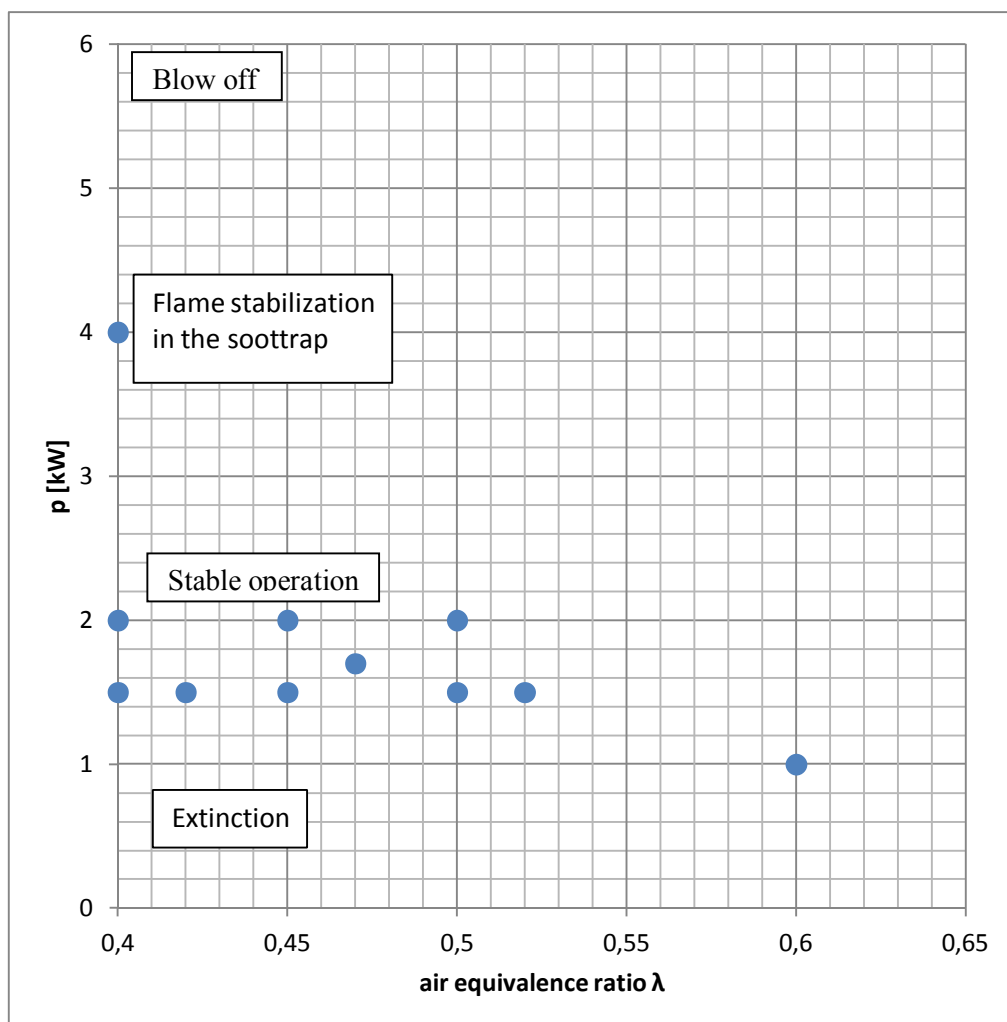
Πίνακας 4.4. Δεύτερος κύκλος πειραμάτων αναμορφωτή

Περίπτωση	N [kW]	λ	mch4 [kg/s]	mair [kg/s]	mmix [kg/s]	Qair [lt/min]	Q ch4[lt/min]	Tmix [°C]
1	1	0,6	1,998E-05	0,000206	0,00022578	9,556	1,679	425,6
2	1,5	0,5	2,997E-05	0,000257	0,00028722	11,945	2,519	418
3	1,5	0,52	2,997E-05	0,000268	0,00029751	12,423	2,519	385,7
4	1,5	0,5	2,997E-05	0,000257	0,00028722	11,945	2,519	407,8
5	1,5	0,46	2,997E-05	0,000237	0,00026664	10,990	2,519	416,7
6	1,5	0,42	2,997E-05	0,000216	0,00024606	10,034	2,519	141,3
7	1,5	0,42	2,997E-05	0,000216	0,00024606	10,034	2,519	407,3
8	1,5	0,42	2,997E-05	0,000216	0,00024606	10,034	2,519	393,3
9	1,5	0,42	2,997E-05	0,000216	0,00024606	10,034	2,519	390
10	1,5	0,42	2,997E-05	0,000216	0,00024606	10,034	2,519	423,4
11	1,5	0,4	2,997E-05	0,000206	0,00023577	9,556	2,519	393,3
12	1,5	0,5	2,997E-05	0,000257	0,00028722	11,945	2,519	413
13	1,5	0,5	2,997E-05	0,000257	0,00028722	11,945	2,519	425,1
14	1,5	0,6	2,997E-05	0,000309	0,00033867	14,334	2,519	390
15	1,5	0,6	2,997E-05	0,000309	0,00033867	14,334	2,519	422

4.5 Πειραματικά αποτελέσματα

4.5.1 Διερεύνηση εύρους λειτουργίας

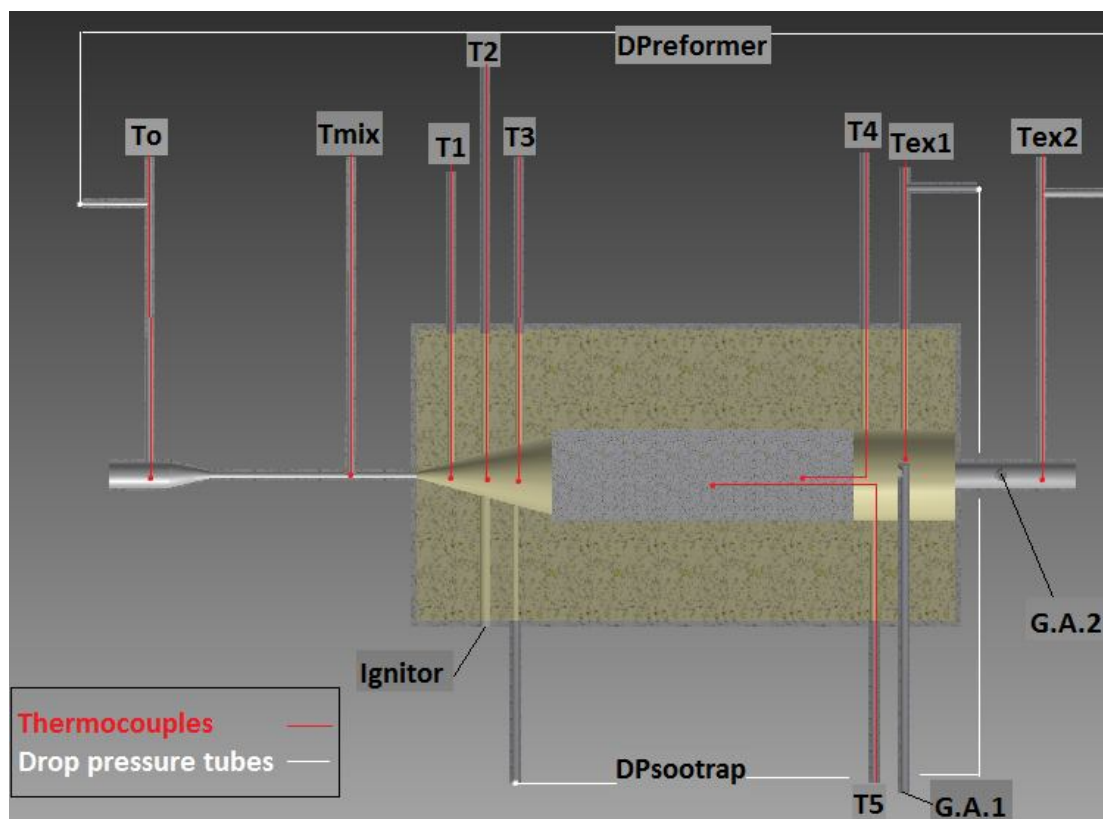
Η διερεύνηση των ορίων λειτουργίας του κατασκευασμένου αναμορφωτή διερευνήθηκε κυρίως στον πρώτο κύκλο πειραμάτων. Οι περιπτώσεις που εξετάστηκαν δεν ήταν αρκετές για να εξακριβώσουμε τα χαρακτηριστικά λειτουργίας του αλλά προέκυψαν κάποια συμπεράσματα τα οποία έδειξαν της ισχύος είναι ο αναμορφωτής σύμφωνα με το μέγεθός τους και περίπου σε ποιά όρια το μέτωπο της φλόγας είναι σταθεροποιημένο εντός του κωνικού τμήματος. Παρακάτω παρουσιάζεται ένας χάρτης με τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν.



Σχ.4.15. Λειτουργία αναμορφωτή για διάφορες τιμές θερμικής ισχύος και λόγου ισοδυναμίας αέρα, για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C.

4.5.2 Θερμοκρασιακά προφίλ και χημικά είδη

Τα θερμοκρασιακά προφίλ στον αναμορφωτή, κατεγράφησαν για όλες τις διερευνηθείσες περιπτώσεις. Η θέση που είχαν τοποθετηθεί τα θερμοζεύγη φαίνεται στο παρακάτω σχήμα. Τα πιο σημαντικά ήταν αυτά που μετρούσαν την θερμοκρασία εντός του κωνικού τμήματος όπου και αναμενόταν το μέτωπο της φλόγας, εντός του soot trap καθώς και στην έξοδο μετά από αυτό. Στο παρακάτω σχήμα επίσης φαίνονται τα σημεία μέτρησης της διαφοράς πιέσεων καθώς και οι θέσεις δειγματοληψίας του καυσαερίου (G.A.1 και G.A.2). Στον πρώτο κύκλο πειραμάτων υπήρχε μόνο το G.A.1 ενός στο δεύτερο προστέθηκε και το G.A.2.

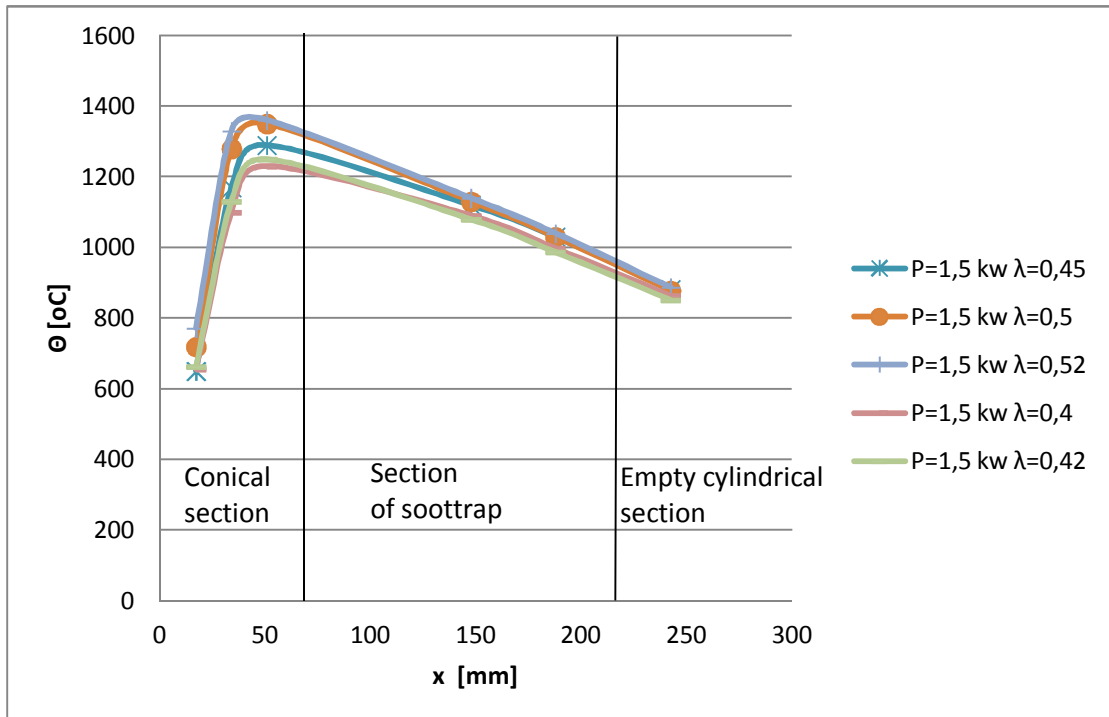


Σχ.4.16. Οι θέσεις των θερμοζευγών, της μέτρησης της διαφοράς πίεσης καθώς και της δειγματοληψίας του καυσαερίου.

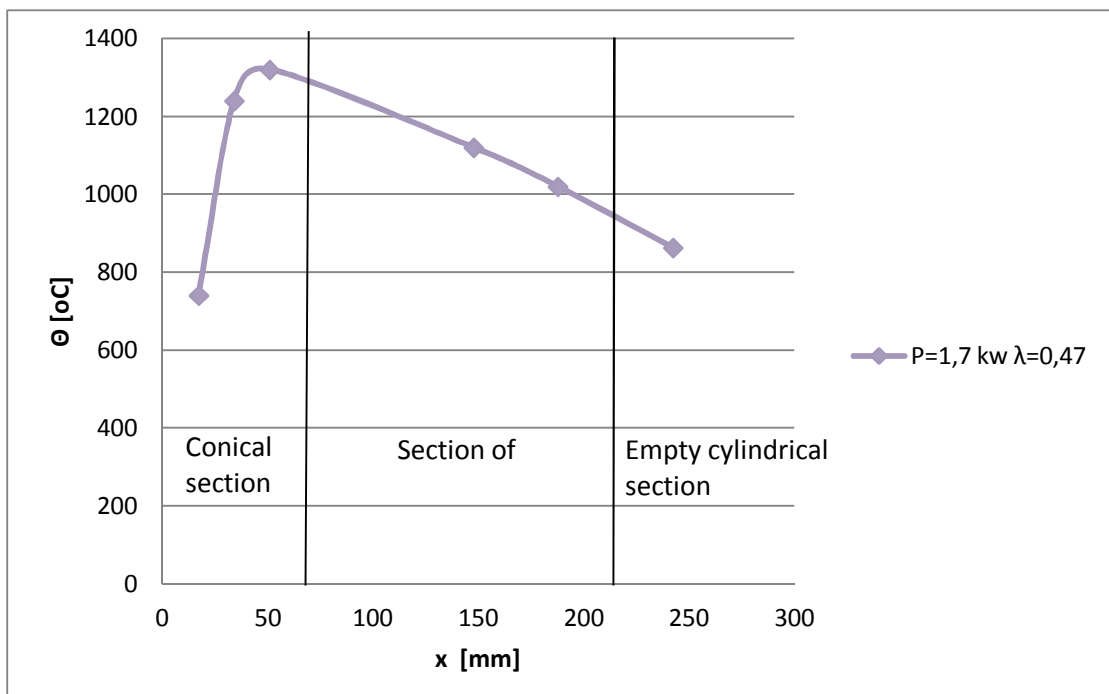
Θερμοκρασιακά προφίλ και για τους δύο κύκλους πειραμάτων

Πρώτος κύκλος πειραμάτων

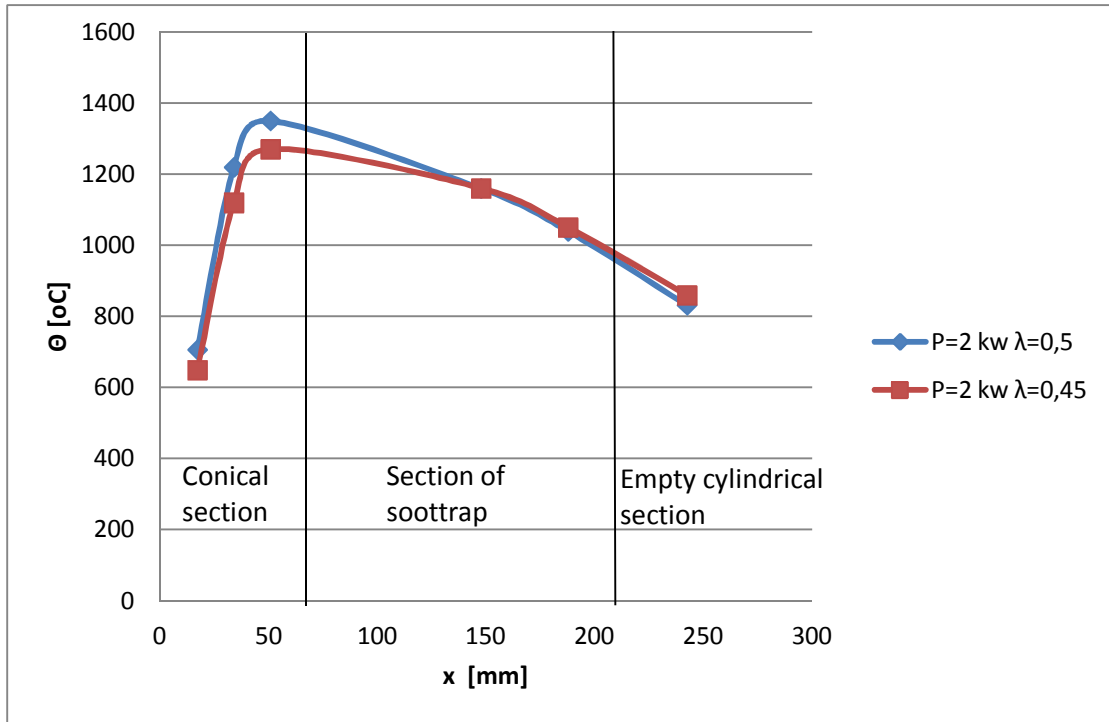
Από την πειραματική διερεύνηση της πρώτης έκδοσης του αναμορφωτή, κατεγράφησαν τα θερμοκρασιακά προφίλ για θερμικές ισχύς 1.5kW, 1.7kW, 2kW, 4kW και διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα. Τα θερμοκρασιακά προφίλ παρουσιάζονται παρακάτω.



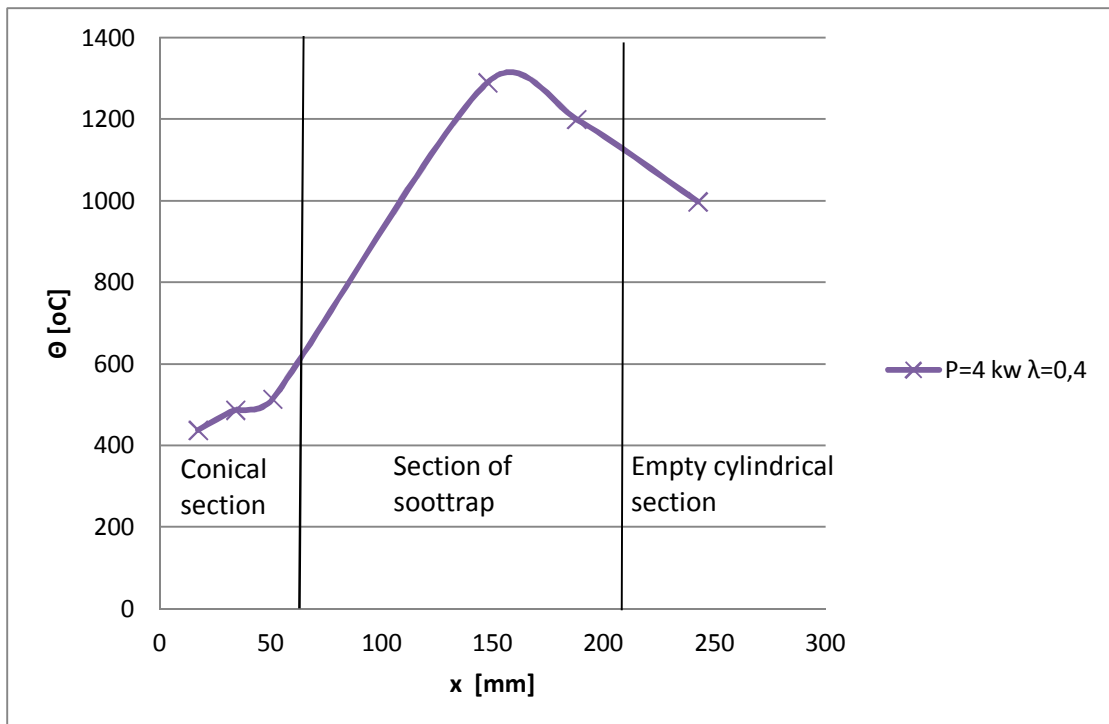
Σχ.4.17. Θερμοκρασιακά προφίλ τα οποία μετρήθηκαν για διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα εσωτερικά του αναμορφωτή, για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C και θερμική ισχύ 1.5 kW.



Σχ.4.18. Θερμοκρασιακό προφίλ εσωτερικά του αναμορφωτή, για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C, θερμική ισχύ 1,7 kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0,47.



Σχ.4.19. Θερμοκρασιακά προφίλ τα οποία μετρήθηκαν για διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα εσωτερικά του αναμορφωτή, για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C και θερμική ισχύ 2 kW.



Σχ.4.20. Θερμοκρασιακό προφίλ εσωτερικά του αναμορφωτή, για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C, θερμική ισχύ 4 kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0,4.

Δεύτερος κύκλος πειραμάτων αναμορφωτή

Από την πειραματική διερεύνηση στην δεύτερη έκδοση του αναμορφωτή, κατεγράφησαν τα θερμοκρασιακά προφίλ για θερμική ισχύ 1.5kW.

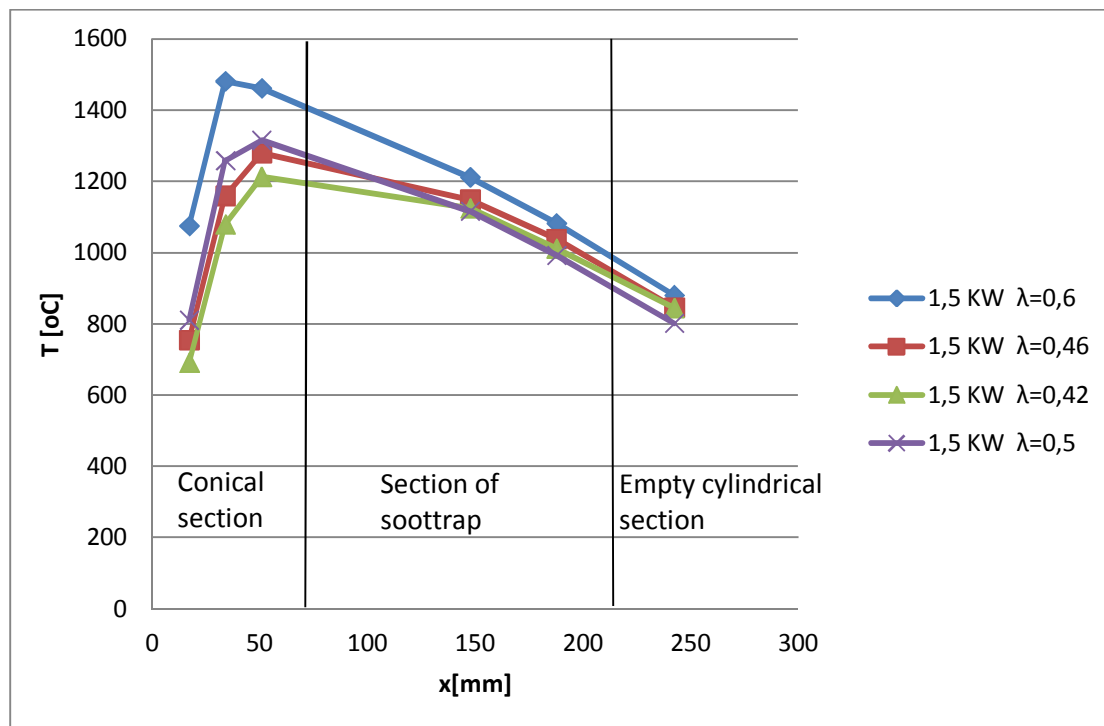


Fig.4.21. Θερμοκρασιακά προφίλ τα οποία μετρήθηκαν για διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα εσωτερικά του αναμορφωτή, για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C και θερμική ισχύ 1,5 kW.

Τα θερμοκρασιακά επίπεδα και στους δύο κύκλους πειραμάτων δείχνουν την αναμενόμενη συμπεριφορά δηλαδή αύξηση του θερμοκρασιακού επιπέδου με αύξηση του λόγου ισοδυναμίας αέρα. Επίσης η υψηλότερη θερμοκρασία υποδεικνύει την θέση σταθεροποίησης της φλόγας. Έτσι μπορούμε να δούμε πώς οι συνθήκες της κάθε περίπτωσης που διερευνήθηκε επηρεάζουν την θέση της φλόγας. Αυτό φαίνεται στο σχήμα 4.21 όπου η μέγιστη θερμοκρασία για θερμική ισχύ 1,5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0,6 εμφανίζεται να έχει μετακινηθεί κατάντη σε σύγκριση με την περίπτωση χαμηλότερων λόγων ισοδυναμίας αέρα. Αυτή η κατάντη μετακίνηση ήταν αναμενόμενη καθώς για αύξηση του λόγου ισοδυναμίας αέρα έχουμε αύξηση της ταχύτητας και άρα μετακίνηση του μετώπου προς τα πίσω σε μικρότερη διατομή για την ίδια ισχύ. Επιπλέον για το μέγεθος του κωνικού τμήματος του αναμορφωτή, δεν ήταν δυνατή η σταθεροποίηση του μετώπου της φλόγας εντός τους για υψηλότερες θερμικές ισχύς όπως φαίνεται στην περίπτωση του σχήματος 4.20 όπου η φλόγα έχει μετακινηθεί εντός του soot trap.

Συγκέντρωση χημικών ειδών και των δύο κύκλων πειραμάτων

Η χρονική εξέλιξη των αντιδράσεων καύσης προαναμεμιγμένου μίγματος μπορεί να χωριστεί σε δύο διακριτές ζώνες, σε μία περιοχή όπου συμβαίνουν γρήγορες αντιδράσεις οξειδωσης και σε μία δεύτερη περιοχή στην συνέχεια όπου κυριαρχείται από αργές ενδόθερμες αντιδράσεις[1]. Τέτοιες αντιδράσεις αυξάνουν την συγκεντρώσεις του H_2 και CO και μειώνουν αντίστοιχα το CH_4 και το H_2O καθώς βαίνουν προς συνθήκες ισορροπίας. Για τους λόγους ισοδυναμίας αέρα που τίθενται σε αυτή στην παρούσα εργασία, θα χρειαζόνταν πολύ μεγάλη χρόνοι για να επιτευχτεί ισορροπία οπότε θα ήταν και πρακτικά αδύνατον να το επιτύχουμε διότι θα χρειαζόταν ένα πολύ μεγάλος σε μήκος αναμορφωτής. Παρ ' όλα αυτά είναι σημαντικό να επιτύχουμε όσο το δυνατόν μεγαλύτερο χρόνο παραμονής ώστε να προσεγγιστεί η ισορροπία στο μέγιστο δυνατό βαθμό.

Μετρήσεις χημικών ειδών του πρώτου κύκλου πειραμάτων

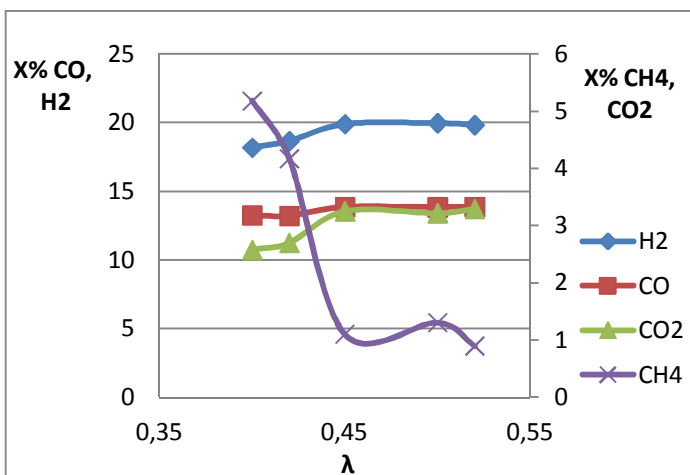
Πίνακας 4.5					
Ισχύ 1,5 kW	Κλάσματα όγκου				
λ	H_2 %	CO %	CO_2 %	CH_4 %	C_2H_2 %
0,4	18,18	13,24	2,58	5,18	0,026
0,42	18,65	13,22	2,7	4,17	0,051
0,45	19,895	13,855	3,255	1,105	0,009
0,5	19,96	13,84	3,22	1,31	0,014
0,52	19,83	13,87	3,29	0,9	0,004

Πίνακας 4.6					
Ισχύ 2 kW	Κλάσματα όγκου				
λ	H_2 %	CO %	CO_2 %	CH_4 %	C_2H_2 %
0,4	16,08	13,7	2,65	6,66	0,003
0,45	18,61	13,47	2,82	3,58	0,006
0,5	18,28	13,4	3,31	2,24	0

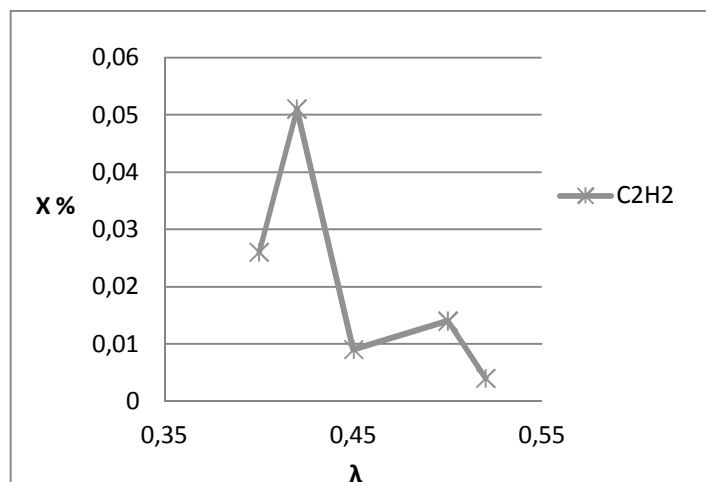
Πίνακας 4.7					
Ισχύ 1,7 kW	Κλάσματα όγκου				
λ	H_2 %	CO %	CO_2 %	CH_4 %	C_2H_2 %
0,47	20,16	13,42	3,02	2,31	0,04

Πίνακας 4.8					
Ισχύ 4 kW	Κλάσματα όγκου				
λ	H ₂ %	CO %	CO ₂ %	CH ₄ %	C ₂ H ₂ %
0,4	20,51	13,71	2,65	5,49	0,074

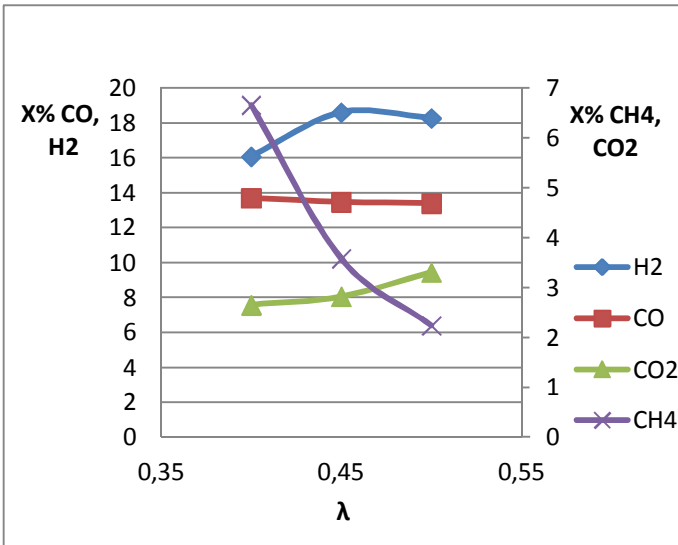
Στα επόμενα σχήματα παρουσιάζονται τα κλάσματα μάζας των χημικών ειδών για την περίπτωση των 1,5 kW και 2kW. Ως μία πρώτη ματιά μπορεί να παρατηρηθεί ότι ο αναμορφωτής που μελετάμε, μπορεί να αποδώσει περίπου 20% H₂ και 14% CO στο παραγόμενο syngas για την περίπτωση του 1,5 kW και λίγο λιγότερο για την περίπτωση των 2 kW. Επιπλέον παρατηρείται ότι το CH₄ και C₂H₂ αυξάνονται με την μείωση του λόγου ισοδυναμίας αέρα. Ωστόσο, μπορεί να παρατηρηθεί ότι για πολύ χαμηλούς λόγους ισοδυναμίας αέρα, το κλάσμα όγκου της ασετιλίνης μειώνεται. Αυτό μπορεί να αποδοθεί στο ότι η ασετιλίνη αρχίζει και καταναλώνεται μέσω άλλων αντιδράσεων προς παραγωγή αιθάλης.



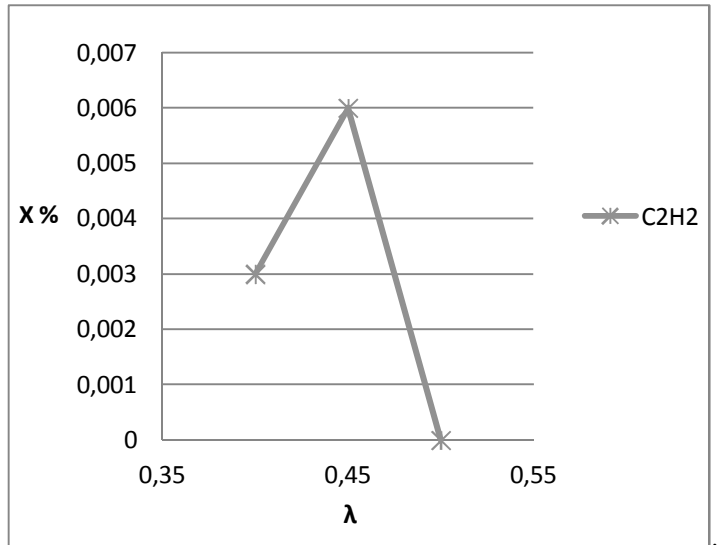
Σχ.4.22 Η σύνθεση του καυσαερίου για τα κυρίαρχα χημικά είδη και το μεθάνιο για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C και θερμική ισχύ 1,5 kW για διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα. (Δειγματοληψία G.A.1)



Σχ.4.23 Η σύνθεση του καυσαερίου σε ασετιλίνη για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C και θερμική ισχύ 1,5 kW για διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα. (Δειγματοληψία G.A.1)



Σχ.4.24 Η σύνθεση του καυσαερίου για τα κυρίαρχα χημικά είδη και το μεθάνιο για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C και θερμική ισχύ 2 kW για διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα. (Δειγματοληψία G.A.1)



Σχ.4.25 Η σύνθεση του καυσαερίου σε ασετιλίνη για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C και θερμική ισχύ 2 kW για διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα. (Δειγματοληψία G.A.1)

Μετρήσεις χημικών ειδών του πρώτου κύκλου πειραμάτων

Στον πίνακα 4.9 παρουσιάζονται τα κλάσματα μάζας και όγκων των χημικών ειδών για κάποιες από τις διερευνηθείσες περιπτώσεις που επιλέχθηκαν από τον πίνακα 4.4. Τα κλάσματα μάζας υπολογίζονται σύμφωνα με τις παρακάτω εξισώσεις:

$$Y_i = X_i \cdot \frac{MW_i}{\overline{MW}} \quad \text{for } i: \text{το κάθε χημικό είδος} \quad \text{Eq. \{4.14\}}$$

$$\overline{MW} = \sum_{i=1}^N x_i \cdot MW_i \quad \text{Eq. \{4.15\}}$$

Όπως φαίνεται από τον πίνακα 4.9 και τα σχήματα 4.56 ή 4.58, απόδοση του υδρογόνου αρχικά αυξάνεται με την αύξηση του λόγου ισοδυναμίας αέρα (0,50 σε 0,46) όπως αναμενόταν, αλλά στην συνέχεια η απόδοση του για $\lambda=0,42$ και 0,4 και ξανά αυξάνεται για $\lambda=0,6$. Αυτή η συμπεριφορά θα μπορούσε να αποδοθεί στην συσσώρευση και αναγέννηση της αιθάλης στο soot trap όπως θα εξηγηθεί στις επόμενες ενότητες.



Πίνακας 4.9

Σύνθεση καυσαερίου επί ξηρού							
		Κλάσματα όγκου					
Περίπτωση	λ	XH ₂ %	Xco %	Xco ₂ %	Xch ₄ %	Xc ₂ h ₂ %	XN ₂ %
4	0,50	19,61	13,37	3,19	1,65	0,0430	62,14
3	0,52	18,22	13,04	3,41	1,47	0,0450	63,82
5	0,46	19,15	13,18	2,97	2,78	0,0470	61,87
10	0,42	14,82	11,80	2,92	6,25	0,0560	64,15
11	0,4	15,86	11,97	3,56	3,58	0,039	64,991
14	0,60	18,15	14,10	3,66	0,44	0,0010	63,65
		Κλάσματα μάζας					
Περίπτωση	λ	YH ₂ %	Yco %	Yco ₂ %	Ych ₄ %	Yc ₂ h ₂ %	YN ₂ %
4	0,50	1,67	15,91	5,97	1,12	0,05	73,95
3	0,52	1,54	15,45	6,35	1,00	0,06	75,61
5	0,46	1,65	15,93	5,64	1,92	0,06	74,80
10	0,42	1,25	13,92	5,41	4,21	0,07	75,68
11	0,40	1,32	13,96	6,52	2,39	0,05	75,77
14	0,60	1,52	16,58	6,76	0,30	0,00	74,84

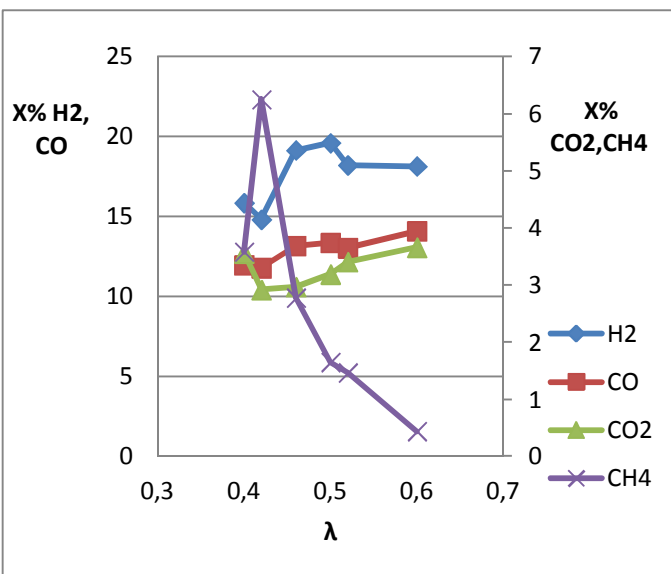


Fig.4.26 Η σύνθεση του καυσαερίου για τα κυρίαρχα χημικά είδη και το μεθάνιο για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C και θερμική ισχύ 1,5 kW για διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα. (Δειγματοληψία G.A.2)

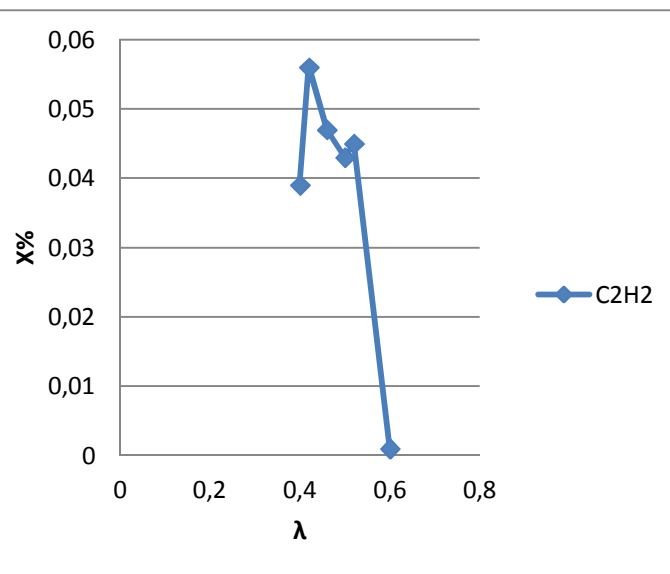


Fig.4.27 Η σύνθεση του καυσαερίου σε ασετιλίνη για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C και θερμική ισχύ 1,5 kW για διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα. (Δειγματοληψία G.A.2)

Η περιεκτικότητα του νερού και κατ' επέκταση η επί υγρού περιεκτικότητα του καυσαερίου υπολογίστηκε από την ισορροπία μάζας του οξυγόνου.

Πίνακας 4.10

Υπολογισμένη σύνθεση καυσαερίου επί υγρού								
Κλάσματα όγκου								
Περίπτωση	λ	X'H ₂ %	X'co %	X'co ₂ %	X'ch ₄ %	X'c ₂ h ₂ %	X'N ₂ %	X'H ₂ O %
4	0,5	17,91	12,21	2,91	1,51	0,0393	56,76	8,65
3	0,52	16,59	11,87	3,10	1,34	0,0410	58,11	8,95
5	0,46	17,46	12,02	2,71	2,54	0,0429	56,42	8,81
10	0,42	13,29	10,59	2,62	5,61	0,0502	57,55	10,29
11	0,4	14,29	10,79	3,21	3,23	0,04	58,57	9,88
14	0,6	16,78	13,03	3,38	0,41	0,0009	58,83	7,57
Κλάσματα μάζας								
Περίπτωση	λ	Y'H ₂ %	Y'co %	Y'co ₂ %	Y'ch ₄ %	Y'c ₂ h ₂ %	Y'N ₂ %	Y'H ₂ O %
4	0,5	1,57	15,02	5,63	1,06	0,0518	69,82	6,84
3	0,52	1,43	14,37	5,91	0,93	0,0531	70,34	6,96
5	0,46	1,54	14,82	5,25	1,79	0,0566	69,57	6,98
10	0,42	1,14	12,74	4,95	3,86	0,0648	69,28	7,96
11	0,4	1,22	12,90	6,03	2,20	0,05	70,02	7,59
14	0,6	1,44	15,61	6,37	0,28	0,0012	70,48	5,83

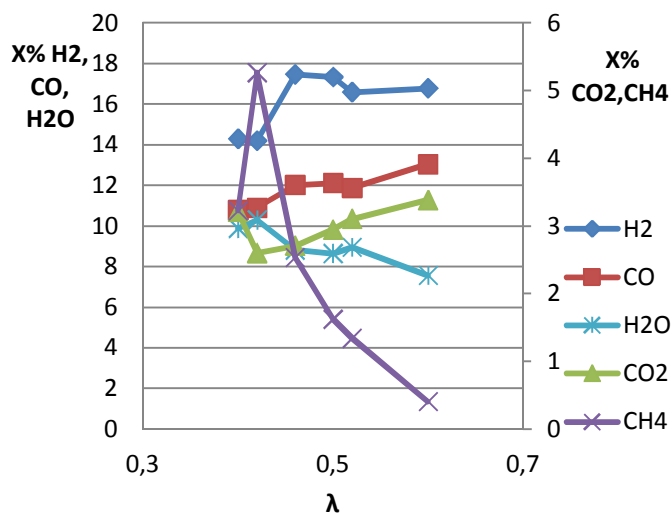


Fig.4.28 Η υπολογισμένη σύνθεση για τα κυρίαρχα χημικά είδη και το μεθάνιο του υγρού syngas για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C και θερμική ισχύ 1,5 kW για διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα. (Δειγματοληψία G.A.2)

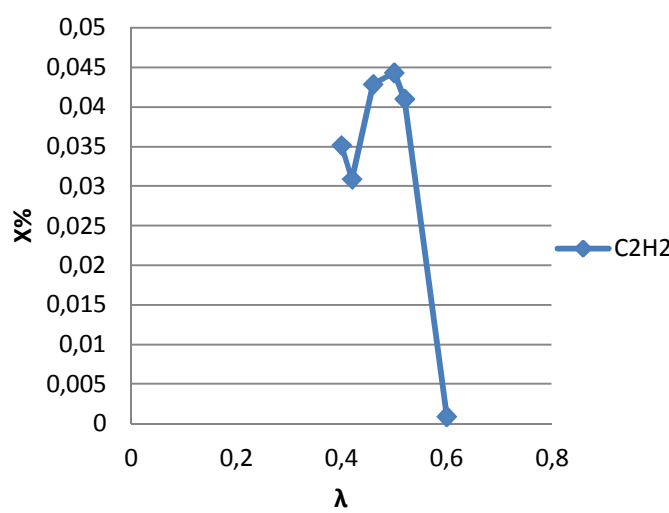
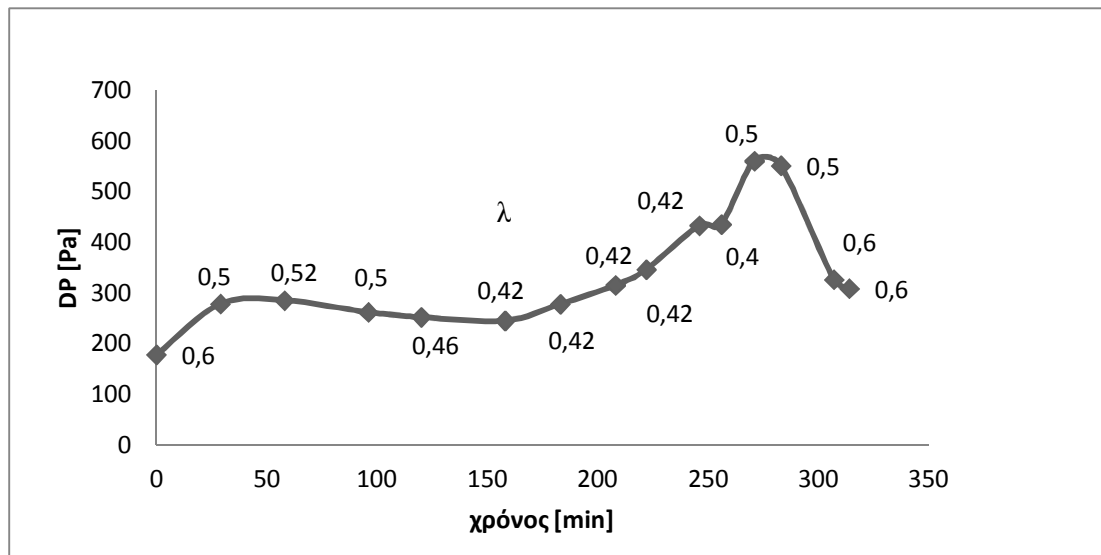


Fig.4.29 Η υπολογισμένη σύνθεση του καυσαερίου σε ασετυλίνη του υγρού syngas για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C και θερμική ισχύ 1,5 kW για διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα. (Δειγματοληψία G.A.2)

4.5.3 Απόδοση αναμόρφωσης/αναγέννηση αιθάλης / κατανομές αιθάλης

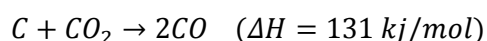
Σε αυτή την ενότητα αξιολογείται η αποδοτικότητα του αναμορφωτή και θα χρησιμοποιηθούν πειραματικά δεδομένα από το δεύτερο κύκλο πειραμάτων. Όπως έχει ήδη αναφερθεί και αυτός ο αναμορφωτής χρησιμοποιεί μία κεραμική πορώδη δομή (wall flow filter από SiC material) όπως και όλοι οι άλλοι αναμορφωτές αλλά η διαφορά είναι ότι στο wall flow filter συσσωρεύεται και κατακρατείται η αιθάλη με αποτέλεσμα η αποδοτικότητα του αναμορφωτή να επηρεάζεται από την δυναμική της αιθάλης. Για αυτό τον λόγο η συσσώρευση και αναγέννηση της αιθάλης θα μελετηθούν σε αυτή την ενότητα.

Οι μετρήσεις πτώσης πίεσης στον αναμορφωτή είναι ένας έμμεσος δείκτης συσσώρευσης αιθάλης. Επιπλέον ο χρόνος λειτουργίας των διερευνηθεισών περιπτώσεων και η σειρά με την οποία εξετάστηκαν ήταν σημαντική παράμετρος στην εμφάνιση συσσώρευσης και αναγέννησης της αιθάλης και επέδρασε στην απόδοση του αναμορφωτή. Η εξέλιξη της πτώσης πίεσης ως συνάρτηση του χρόνου των πειραμάτων (πίνακας 4.4) φαίνεται στο παρακάτω σχήμα 4.30:

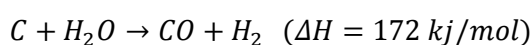


Σχ. 4.30 : Η εξέλιξη της πτώσης πίεσης στο soot trap ως συνάρτηση του χρόνου κατά την διάρκεια των πειραματικών δοκιμών για όλες τις διερευνηθείσες περιπτώσεις του δεύτερου κύκλου πειραμάτων.

Στο σχήμα 4.60 μπορεί να παρατηρηθεί ότι υπάρχει αύξηση της πτώσης πίεσης στο soot trap για $\lambda=0,42$. Με το πέρασ του χρόνου η πτώση πίεσης αυξάνεται και αυτό είναι ένδειξη ότι στο soot trap συσσωρεύεται αιθάλη. Για όλες τις περιπτώσεις που κατεγράφησαν για λόγο ισοδυναμίας αέρα 0,42 η θερμοκρασία στην είσοδο του soot trap ήταν περίπου 1200°C. Μειώνοντας περισσότερο το λ σε 0,4 παρατηρείται μία απότομη αύξηση εξαιτίας της περισσότερης παραγωγής αιθάλης. Στην συνέχεια το λ αυξήθηκε σε 0,5 και παρατηρήθηκε απότομη μείωση της πτώσης πίεσης, το οποίο είναι ένδειξη της αναγέννησης της αιθάλης. Η θερμοκρασία εισόδου σε αυτή την περίπτωση ήταν 1300°C. Το ότι συμβαίνει αναγέννηση του άνθρακα δηλαδή έχουν ενεργοποιηθεί οι αντιδράσεις Boudouard μπορεί να ενισχυθεί και από άλλες ενδείξεις. Στον πίνακα 4.11 φαίνεται πώς εξελίσσονται τα κλάσματα όγκου των χημικών ειδών του υγρού μίγματος. Μέχρι να εμφανιστεί το soot point φαίνεται μία τάση του H_2 , CO και του CH_4 να αυξηθούν μειώνοντας το λ . Στο soot point μειώνονται και όταν το λ πάρει πάλι υψηλότερες τιμές 0,5 με 0,6 παρατηρείται αύξηση τους και μείωση του νερού που υποδεικνύει την ενεργοποίηση των αντιδράσεων Boudouard.



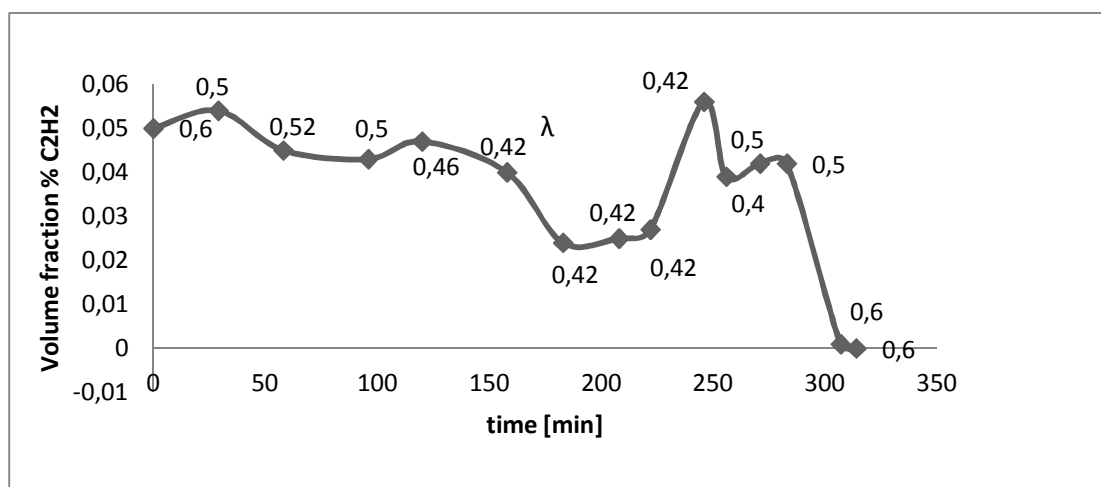
Αντιδράσεις Boudouard
(από την ενότητα 2.3)



Πίνακας 4.12

Περιπτώσεις	N [kW]	λ	X'H2 %	X'co %	X'co2 %	X'ch4 %	X'c2h2 %	X'N2 %	X'H2O%
1	1	0,6	13,54	10,61	3,66	0,68	0,04	61,01	10,45
2	1,5	0,5	16,70	11,98	2,97	1,73	0,05	57,67	8,91
3	1,5	0,52	16,59	11,87	3,10	1,34	0,04	58,11	8,95
4	1,5	0,5	17,97	12,25	2,92	1,51	0,04	56,93	8,39
5	1,5	0,46	17,46	12,02	2,71	2,54	0,04	56,42	8,81
6	1,5	0,42	16,31	11,46	2,55	4,29	0,04	55,91	9,45
7	1,5		14,25	10,99	2,64	5,36	0,02	56,66	10,08
8	1,5		13,76	10,75	2,63	5,53	0,02	56,87	10,44
9	1,5		13,46	10,79	2,57	5,54	0,02	57,01	10,60
10	1,5		13,21	10,52	2,60	5,57	0,05	57,18	10,88
11	1,5	0,4	14,27	10,77	3,20	3,22	0,04	58,48	10,03
12	1,5	0,5	14,83	10,87	3,20	2,98	0,04	58,25	9,83
13	1,5								
14	1,5	0,6	16,78	13,03	3,38	0,41	0,00	58,83	7,57
15	1,5		17,09	12,59	3,35	0,33	0,00	58,64	8,00

Είναι ενδιαφέρον να παρατηρηθεί πώς εξελίσσεται το κλάσμα όγκου της ασετιλίνης (σχήμα 4.31) κατά την διάρκεια του πειράματος, σε σύγκριση με την πτώση πίεσης η οποία υποδεικνύει την συσσώρευση της αιθάλης (σχήμα 4.30). Όπως μπορεί να παρατηρηθεί από την σύγκριση των δύο σχημάτων όταν το soot point εμφανίζεται για $\lambda=0,42$ το κλάσμα όγκου της ασετιλίνης μειώνεται όπως θα αναμενόταν δεδομένου ότι καταναλώνεται προς δημιουργία αιθάλης. Αρχικά μία απότομη μείωση της παρατηρήθηκε και στην συνέχεια η μετρούμενη ποσότητα της παραμένει περίπου σταθερή που σημαίνει ότι επήλθε χημική ισορροπία μέχρι της στιγμή που οι συνθήκες δεν ευνοούν περαιτέρω την παραγωγή αιθάλης και η ποσότητα της ασετιλίνης ξανά αυξάνεται. Την ίδια συμπεριφορά παρατηρούμε μειώνοντας το λόγο ισοδυναμίας αέρα στο 0,4. Όταν εν συνεχεία αυξάνεται σε 0,5 το κλάσμα όγκου της ασετιλίνης μειώνεται, και για 0,6 εξαλείφεται δεδομένου ότι αυτές οι συνθήκες δεν ευνοούν την ύπαρξή της.



Σχ.4.31. Η εξέλιξη του κλάσματος όγκου της ασετιλίνης κατά την διάρκεια της πειραματικής διαδικασίας των διερευνηθεισών περιπτώσεων.



Η αποδοτικότητα του αναμορφωτή μπορεί να υπολογιστεί από τις παρακάτω εξισώσεις και οι τιμές της για την κάθε περίπτωση που διερευνήθηκε παρουσιάζονται στον πίνακα 4.13 και στο σχήμα 4.32.

Η απόδοση μπορεί να οριστεί ως:

$$\eta = \frac{n_{H_2} \cdot LHV_{H_2} + n_{CO} \cdot LHV_{CO}}{n_{CH_4} \cdot LHV_{CH_4}} \quad \text{Eq. \{4.37\}}$$

Επιλύοντας την εξίσωση 4.37 ως προς γνωστές ποσότητες, λαμβάνουμε την παρακάτω εξίσωση.:

$$\eta = \frac{n_{N_2}}{n_{CH_4}} \cdot \frac{(X'_{H_2} \cdot LHV_{H_2} + X'_{CO} \cdot LHV_{CO})}{X'_{N_2} \cdot LHV_{CH_4}} \quad \text{Eq. \{4.38\}}$$

Όπου,

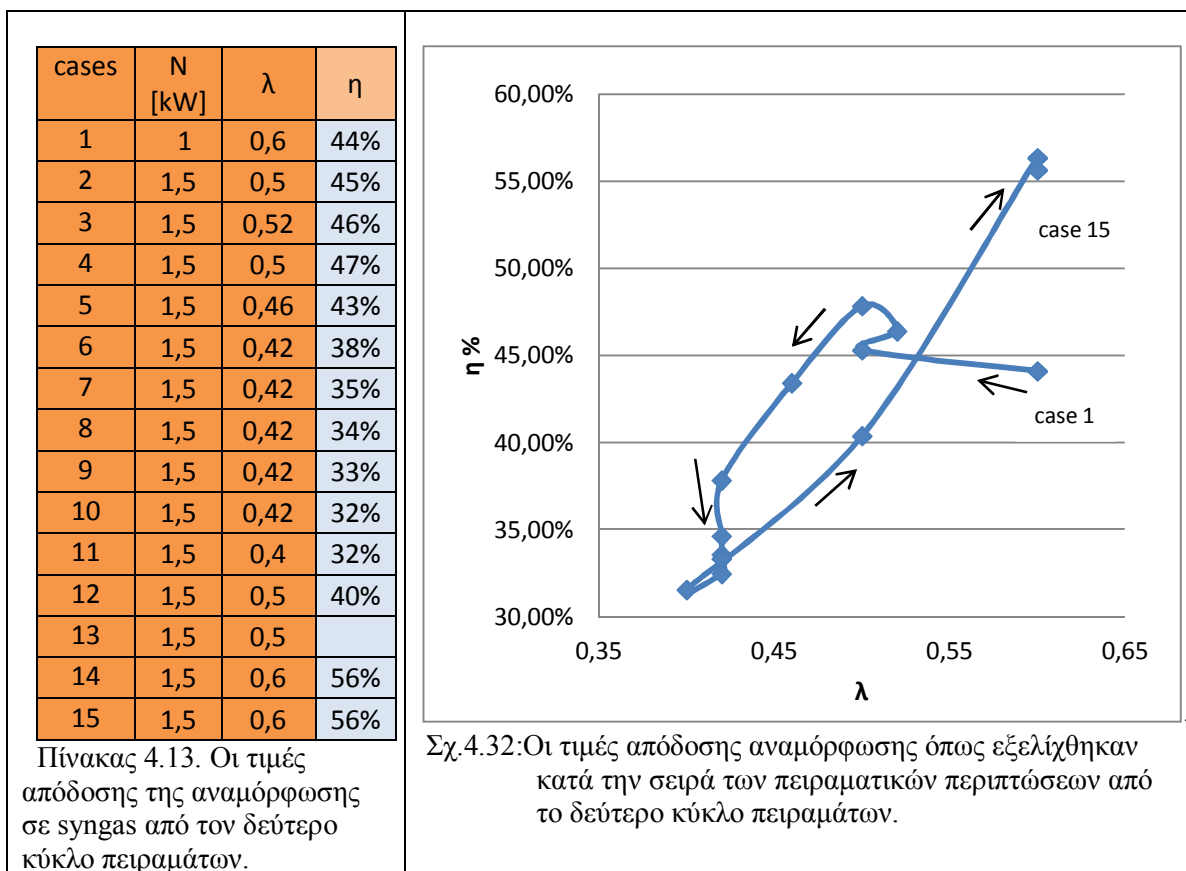
$$n_{N_2} = \frac{\dot{Q}_{N_2} \cdot \rho_{N_2}}{28} \quad \text{Eq. \{4.39\}}$$

$$n_{N_2} = \frac{\dot{m}_{CH_4}}{16} \quad \text{Eq. \{4.40\}}$$

$$LHV_{H_2} = 119494 \left[\frac{kJ}{kg} \right] \cdot \frac{101326 \cdot 1}{8314 \cdot 273,15} \left[\frac{kg}{m^3} \right] = 5331,58 \left[\frac{kJ}{m^3} \right] \quad \text{Eq. \{4.41\}}$$

$$LHV_{CO} = 119494 \left[\frac{kJ}{kg} \right] \cdot \frac{101326 \cdot 28}{8314 \cdot 273,15} \left[\frac{kg}{m^3} \right] = 12630,45 \left[\frac{kJ}{m^3} \right] \quad \text{Eq. \{4.42\}}$$

$$LHV_{CH_4} = 119494 \left[\frac{kJ}{kg} \right] \cdot \frac{101326 \cdot 16}{8314 \cdot 273,15} \left[\frac{kg}{m^3} \right] = 35633,68 \left[\frac{kJ}{m^3} \right] \quad \text{Eq. \{4.43\}}$$



Στο σχήμα 4.62 φαίνεται η εξέλιξη της απόδοσης του αναμορφωτή από την μία διερευνηθείσα περίπτωση στην άλλη με την σειρά που εξελίχθηκαν τα πειράματα. Μπορεί να φανεί ότι η αποδοτικότητα του αναμορφωτή αυξήθηκε με την μείωση του λόγου ισοδυναμίας αέρα στις πρώτες περιπτώσεις και μειώθηκε όταν εμφανίστηκε το soot point για $\lambda=0.42$. Όταν το λ αυξήθηκε πάλι, η απόδοση αυξήθηκε και για $\lambda=0.6$ έλαβε τις υψηλότερες τιμές της. Όπως αναφέρθηκε και αποδείχθηκε στις προηγούμενες παραγράφους στις τελευταίες περιπτώσεις οι αντιδράσεις Boudourd ήταν ενεργοποιημένες και οι υψηλότερες τιμές απόδοσης μπορούν να αποδοθούν στην μεγαλύτερη παραγωγή H_2 και CO από την αραιοποίηση του άνθρακα. Επίσης απόδοση του αναμορφωτή όντας ακόμα το soot trap καθαρό, έφτασε το 47% για $\lambda=0.5$.

Κατανομές αιθάλης

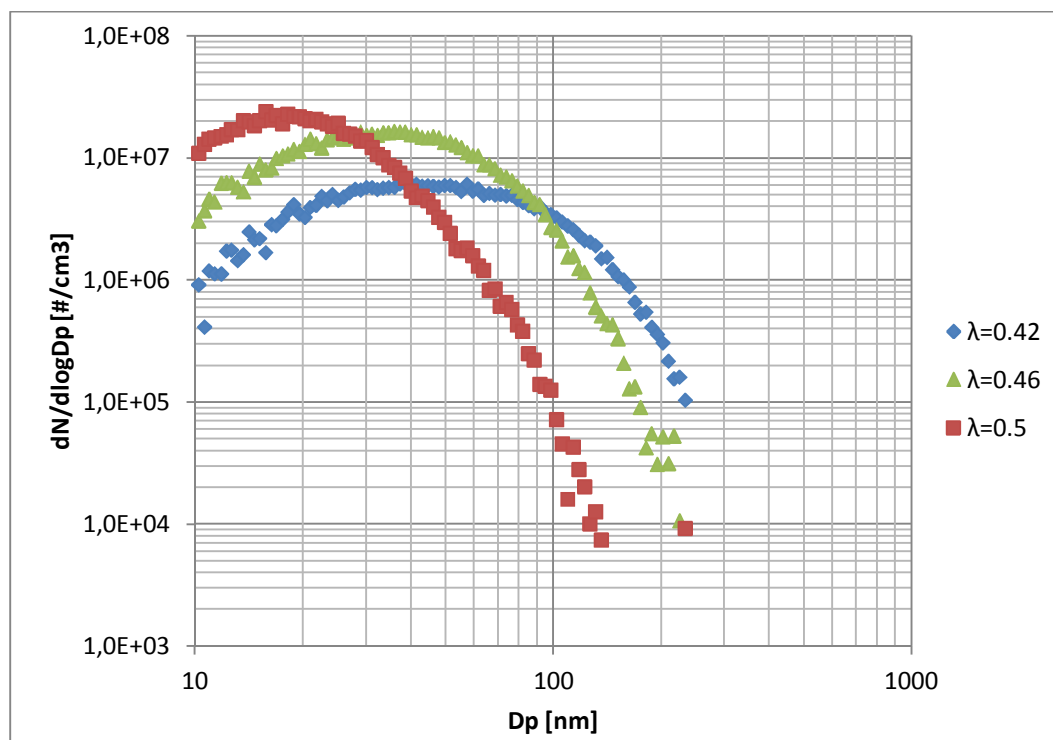
Η μετρήσεις σωματιδίων αιθάλης διενεργήθηκαν κατά τον δεύτερο κύκλο πειραμάτων για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.5, 0.46 και 0.42. Η σειρά των συνθηκών (θερμική ισχύς, λόγος ισοδυναμίας αέρα) που διερευνήθηκαν φαίνεται στον παρακάτω μαζί με τις συνθήκες του συστήματος για την μέτρηση της αιθάλης.

Πίνακας 4.14. Διερευνηθείσες περιπτώσεις και συνθήκες συστήματος μέτρησης αιθάλης

N[kW]	λ	QN2 [lt/min]	T _{mix} [lt/min]	Q _{pump} [lt/min]	DR (Dilution Ratio)	sample number
1,5	0,50	21	160	26	5,5	11
1,5	0,46	21	160	26	5,5	11
1,5	0,42	21	160	26	5,5	12
1,5	0,42	21	160	26	5,5	9
1,5	0,50	21	160	26	5,5	9
1,5	0,60	21	160	26	5,5	6

Στο σχήμα 4.33 απεικονίζονται οι κατανομές διαμέτρου των εντοπισμένων σωματιδίων αιθάλης. Τα αποτελέσματα προέρχονται από τις διερευνηθείσες περιπτώσεις του πίνακα 4.4. Όπως ήδη έχει αναφερθεί το δείγμα είχε αραιωθεί με άζωτο, η θερμοκρασία του είχε μειωθεί που σημαίνει ότι επιδράσαμε στον όγκο του και επομένως στην συγκέντρωση των σωματιδίων. Επιπλέον κατά την μεταφορά του δείγματος υπήρξαν απώλειες διάχυσης σωματιδίων στα τοιχώματα η οποίες όπως μπορεί να υπολογιστούν προσεγγιστικά.

Αυτές οι διορθώσεις έγιναν ώστε τα αποτελέσματα που μας έδωσε το SMPS να αντιστοιχούν στο πραγματικό δείγμα που πήραμε και οπότε στο σχήμα 4.33 παρουσιάζονται οι διορθωμένες κατανομές. Επίσης τα σημαντικά χαρακτηριστικά των κατανομών για όλες όμως τις περιπτώσεις που μετρήθηκαν, παρουσιάζονται στον πίνακα 4.144.



Σχ.4.33. Η μεταβολή των κατανομών μεγέθους των σωματιδίων αιθάλης στην έξοδο του αναμορφωτή για διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα, προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C και θερμική ισχύ 1.5 kW.



λ	Μέση διάμετρος D_p [nm]	Τυπική απόκλιση S_g	Αριθμός συγκέντρωσης [# /cm ³]	Συγκέντρωση μάζας [mg/cm ³]
0,5	21,25	1,60	1,17E+07	1,53E-04
0,46	38,35	1,79	1,11E+07	1,63E-04
0,42	51,87	1,97	4,85E+06	3,71E-04
0,5	17,47	1,65	3,33E+09	5,40E-07
0,6	Δεν εντοπίστηκαν σωματίδια	Δεν εντοπίστηκαν σωματίδια	Δεν εντοπίστηκαν σωματίδια	Δεν εντοπίστηκαν σωματίδια

Πίνακας 4.15. Χαρακτηριστικά μετρούμενης αιθάλης για τις διερευνηθείσες περιπτώσεις του αναμορφωτή, για προθέρμανση αντιδρώντων στους 400°C και θερμική ισχύ 1,5 kW.

Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι η πλειοψηφία των σωματιδίων που εντοπίστηκαν έχουν μέγεθος από 10 nm μέχρι και λίγο πάνω 110 nm. Όπως αναμενόταν η μέση διάμετρος των σωματιδίων αυξήθηκε με την μείωση του λόγου ισοδυναμίας αέρα. Επίσης ο αριθμός της συγκέντρωσης των σωματιδίων θα αναμενόταν να αυξάνεται, αλλά όπως βλέπουμε από τον πίνακα 4.12 μειώνεται από $\lambda=0.46$ σε 0,42. Αυτό θα μπορούσε να αποδοθεί στο ότι η απόδοση του soot trap στο να συγκρατήσει σωματίδια αυξάνεται με την αύξηση του μεγέθους των σωματιδίων. Όταν η αναγέννηση ξεκινήσει για $\lambda=0,5$ τα συσσωματώματα της αιθάλης μέσα στο soot trap αρχίζουν να διαλύονται με αποτέλεσμα μεγαλύτερος αριθμός σωματιδίων να μετρηθεί.



Κεφάλαιο 5^ο: Προσομοίωση χημικής κινητικής στον Αναμορφωτή

5.1 Προσομοίωση χημικής κινητικής μερικής οξείδωσης μεθανίου χρησιμοποιώντας ένα GRI μηχανισμό 19 χημικών ειδών.

Μία προσομοίωση μερικής οξείδωσης μεθανίου διενεργήθηκε στον αναμορφωτή. Η γεωμετρία και το πλέγμα του μοντέλου έχουν περιγραφεί αναλυτικά στην παράγραφο 3.1 (2ο πρωτότυπο) και στην 3.3 αντίστοιχα.

Ο μειωμένος χημικός μηχανισμός GRI-MECH

Ένας μειωμένος χημικός μηχανισμός αποτελούμενος από 19 χημικά είδη για καύση μεθανίου χρησιμοποιήθηκε. Ο μειωμένος αυτός μηχανισμός δημιουργήθηκε από τους Andrei Kazakov και Michael Frenklach του Πανεπιστημίου της Καλιφόρνια στο Berkeley [17]. Ο τρόπος μείωσης του μηχανισμού βασίστηκε στα [18],[19],[20].

Η στοιχειώδεις αντιδράσεις του μηχανισμού δίνονται στο παράρτημα C και τα χημικά είδη από τα οποία αποτελείται φαίνονται στην συνέχεια.

```
ELEMENTS
O H C N AR
SPECIES
H2 H O O2 OH H2O HO2
CH2 CH2(S) CH3 CH4 CO CO2 HCO
CH2O CH3O C2H4 C2H5 C2H6
N2 AR
```

Οι περιπτώσεις που προσημειώθηκαν

Η αριθμητική προσομοίωση διενεργήθηκε για τέσσερις διαφορετικές συνθήκες καύσης. Ειδικότερα για θερμική ισχύ 1,5kW και για τέσσερις διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας αέρα, 0.42, 0.46, 0.5 και 0.6. Επιπλέον για την κάθε περίπτωση η κατάλληλη συντελεστές για το πορώδες πεδίο υπολογίστηκαν σύμφωνα με την παράγραφο 3.6.2, με σκοπό την αναπαράσταση του soot trap ως porous packed bed. Η θερμικές απώλειες του μοντέλου δεν υπολογίστηκαν με λεπτομέρεια αλλά προσεγγίστηκαν σε σύγκριση με τα θερμοκρασιακά προφίλ του πειράματος. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης στην συνέχεια συγκρίθηκαν με τα πειραματικά του κεφαλαίου 4.

Πίνακας 5.1 Οι αρχικές συνθήκες των προσομοιώσεων στο ANSYS

N[kW]	λ	T _{mix} [K]	U _{in} [m/s]	X _{CH4}	X _{O2}	X _{N2}	C ₂ [1/m]	$\frac{1}{K_{an}}$ [1/m ²]
1.5	0.42	680.45	3.93	0.9419	0.0122	0.0459	10860.785	31176902.42
	0.46	689.85	4.286	0.935	0.0137	0.0515	9421.77	29308145.41
	0.5	691.15	4.598	0.9292	0.0148	0.0559	8746.675	29308145.41
	0.6	663.15	5.14	0.9235	0.0161	0.0605	8297.097	32781854.28

5.1.1 Σχετικά με την σύγκλιση των προσομοιώσεων

Με σκοπό να επιτευχθεί σύγκλιση ήταν σημαντικό να ακολουθηθούν κάποια βήματα. Πρώτα γινόταν προσομοίωση του πεδίου ταχύτητας χωρίς χημεία. Η λύση αυτή χρησιμοποιούταν στην αρχικοποίηση του πεδίου για την προσομοίωση της χημείας. Εκτός από αυτό στην αρχικοποίηση για την προσομοίωση της χημείας ήταν σημαντικό να εκτιμηθούν στην ζώνη αντίδρασης κάποιες αρχικές τιμές των πιο σημαντικών χημικών ειδών καθώς και η θερμοκρασία η οποία θα έπρεπε να τεθεί πάνω από 1600 [K].

Οι συντελεστές χαλάρωσης με τους οποίους ουσιαστικά ελέγχουμε την σύγκλιση κυμαίνονταν από 0.95 με 1 για τα χημικά είδη και την ενέργεια. [16]

Σχετικά με τα κριτήρια σύγκλισης ήταν $5 \cdot 10^{-4}$ για μάζα, 10^{-3} για χημικά είδη και 10^{-5} για την ενέργεια.

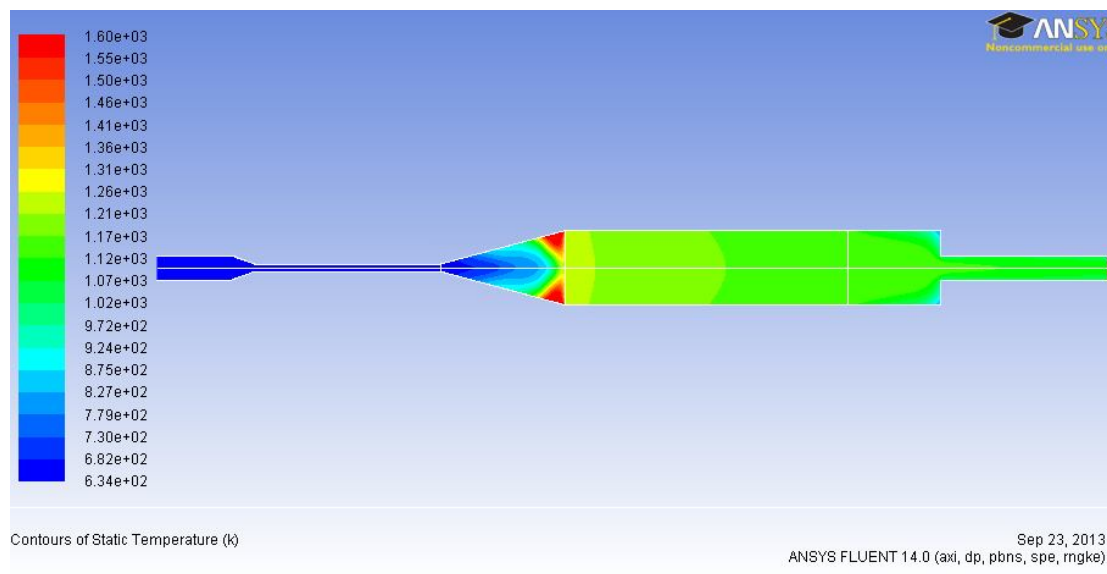
5.1.2 Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης και σύγκριση με τα πειραματικά

Σε αυτή την ενότητα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης σε σύγκριση με τα πειραματικά του κεφαλαίου 4. Όπως περιγράφηκε στο κεφάλαιο 4 δύο κύκλοι πειραμάτων πραγματοποιήθηκαν στον ίδιο σχέδιο αναμορφωτή. Τα πειραματικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται στον πίνακα 5.2 προέρχονται από τον δεύτερο κύκλο πειραμάτων και θα χρησιμοποιηθούν για την σύγκριση με τα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

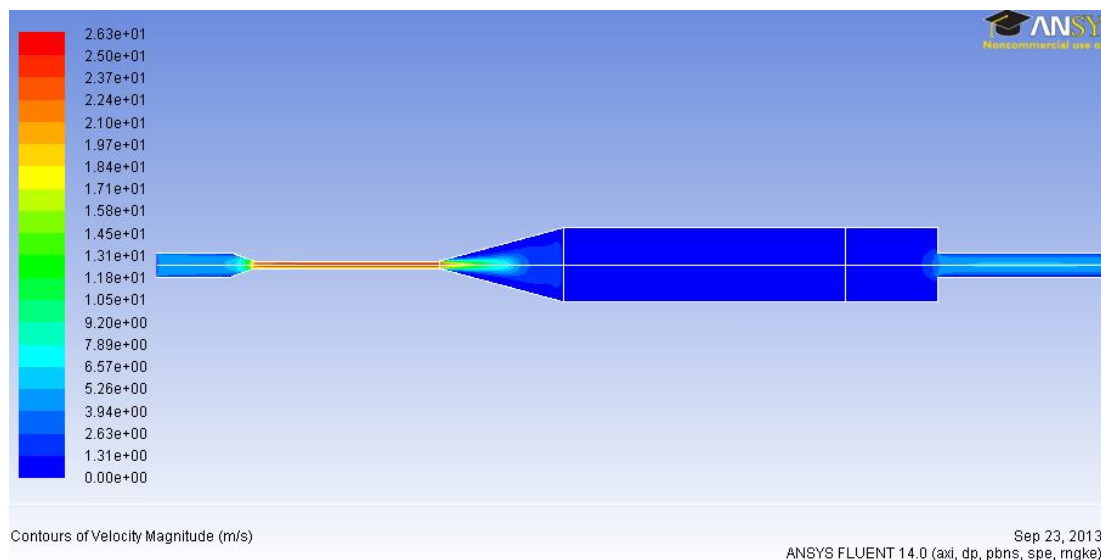
Πίνακας 5.2. Κλάσματα όγκου χημικών ειδών στο υγρό μίγμα και πτώσεις πίεσης από τον δεύτερο κύκλο πειραμάτων.

λ	X'H2 %	X'co %	X'co2 %	X'ch4 %	X'H2O %	Dpsootrap [Pa]
0,42	14,192	10,898	2,600	5,262	10,291	245
	±0,149	±0,113	±0,026	±0,053	±0,211	±1,96
0,46	17,463	12,019	2,708	2,535	8,811	252
	±0,189	±0,125	±0,027	±0,027	±0,183	±2,02
0,5	17,329	12,113	2,946	1,621	8,649	262
	±0,187	±0,126	±0,030	±0,016	±0,181	±2,1
0,6	16,776	13,033	3,383	0,407	7,569	308
	±0,180	±0,137	±0,034	±0,004	±0,160	±2,46

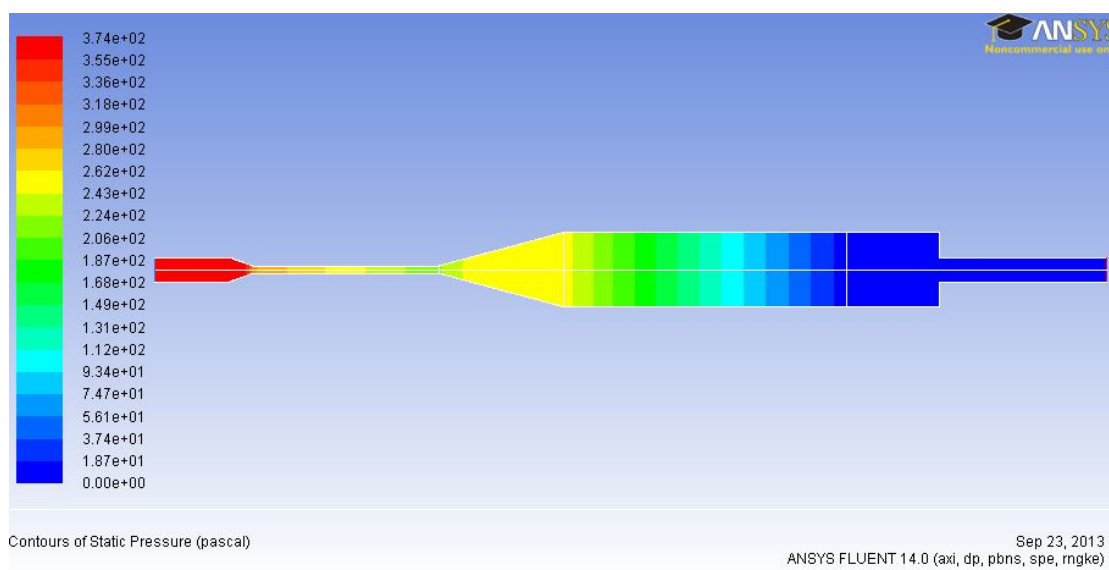
Περίπτωση: 1.5 kW και $\lambda=0.42$



Σχ.5.1 Πεδίο **θερμοκρασίας** για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.42

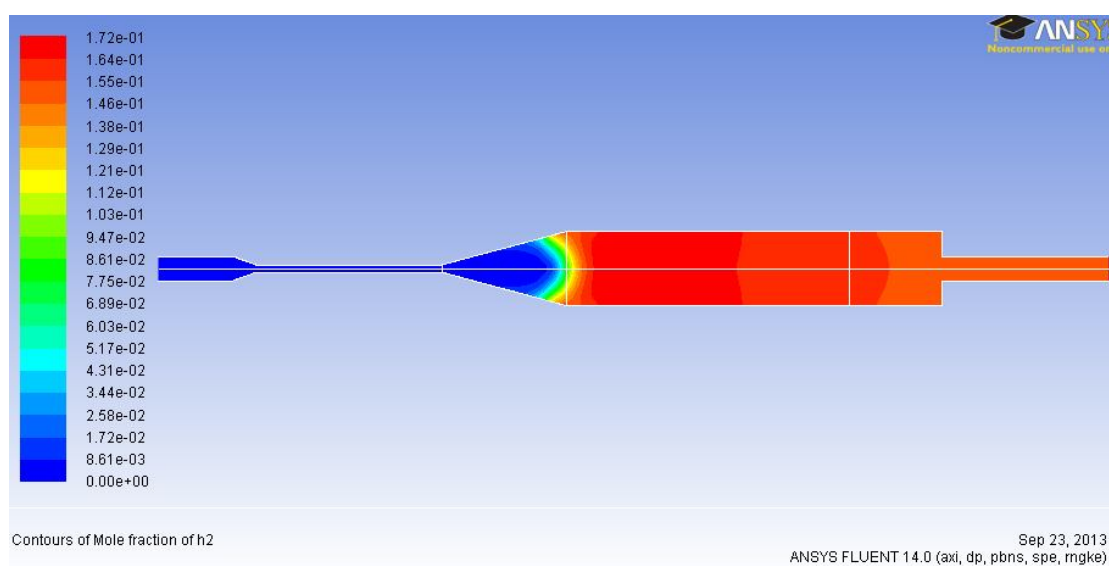


Σχ.5.2 Πεδίο **ταχύτητας** για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγος ισοδυναμίας αέρα 0.42



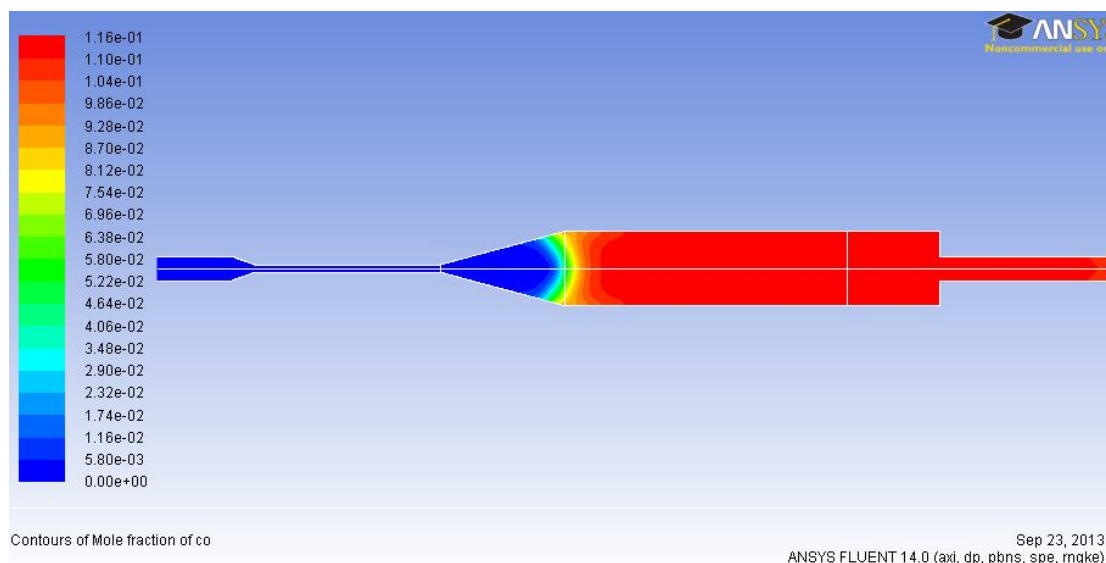
Σχ.5.3 Πεδίο πτώσης πίεσης για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.42

Πίνακας 5.3	Τιμή πτώσης πίεσης του soot trap [Pa]
Προσομοίωση	242.89
Πείραμα	245±1.96



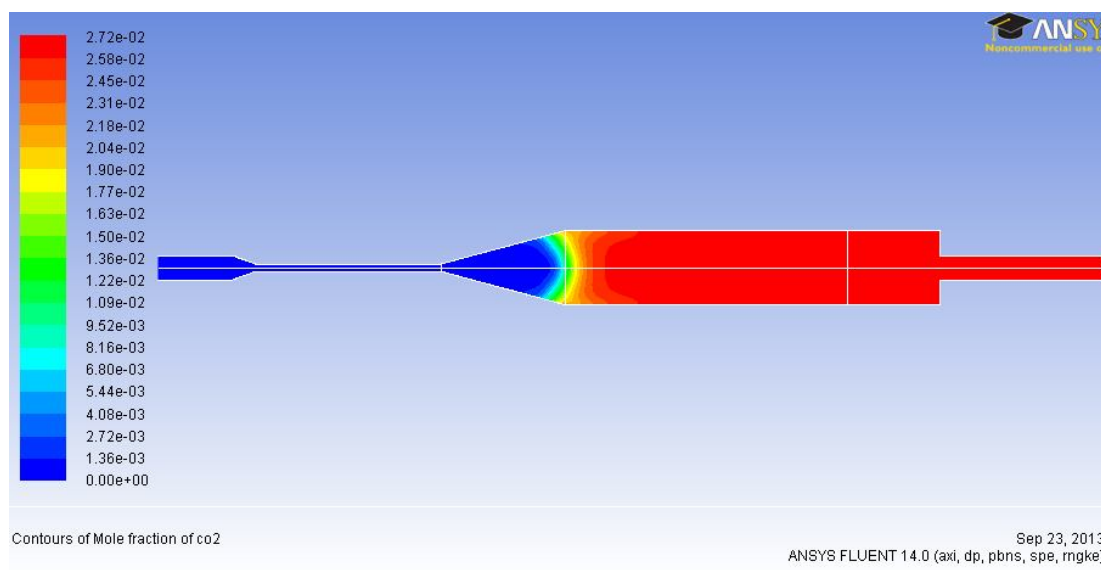
Σχ.5.4 Πεδίο κλάσματος όγκου H_2 για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.42

Πίνακας 5.4	Τιμή κλάσματος μάζας% του H_2 στην έξοδο
Προσομοίωση	15.50
Πείραμα	14.192±0.149



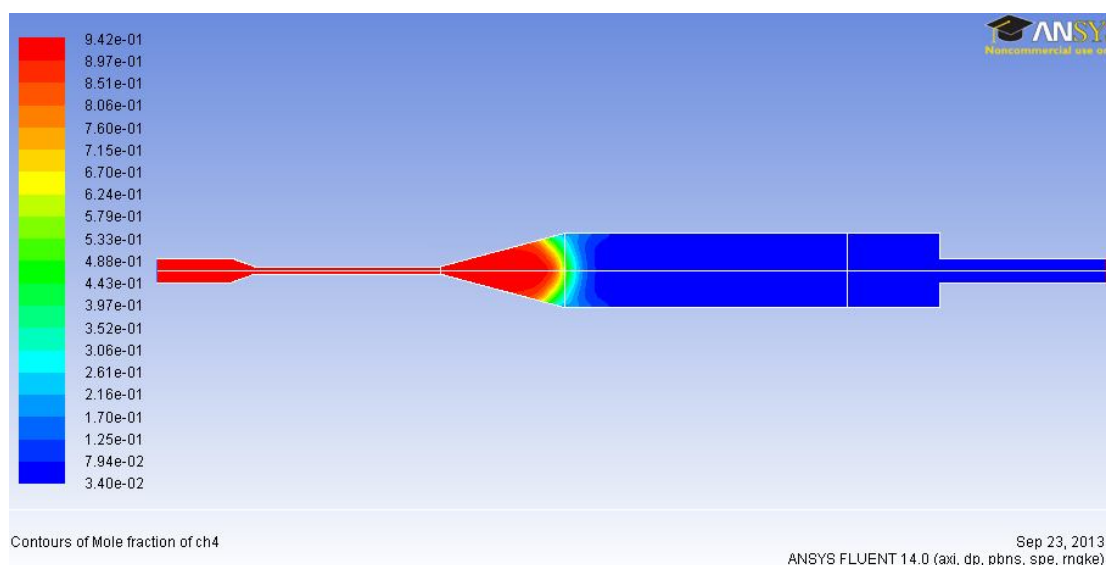
Σχ.5.5 Πεδίο κλάσματος όγκου CO για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.42

Πίνακας 5.5	Τιμή κλάσματος μάζας% του CO στην έξοδο
Προσομοίωση	11.6
Πείραμα	10.898±0.113



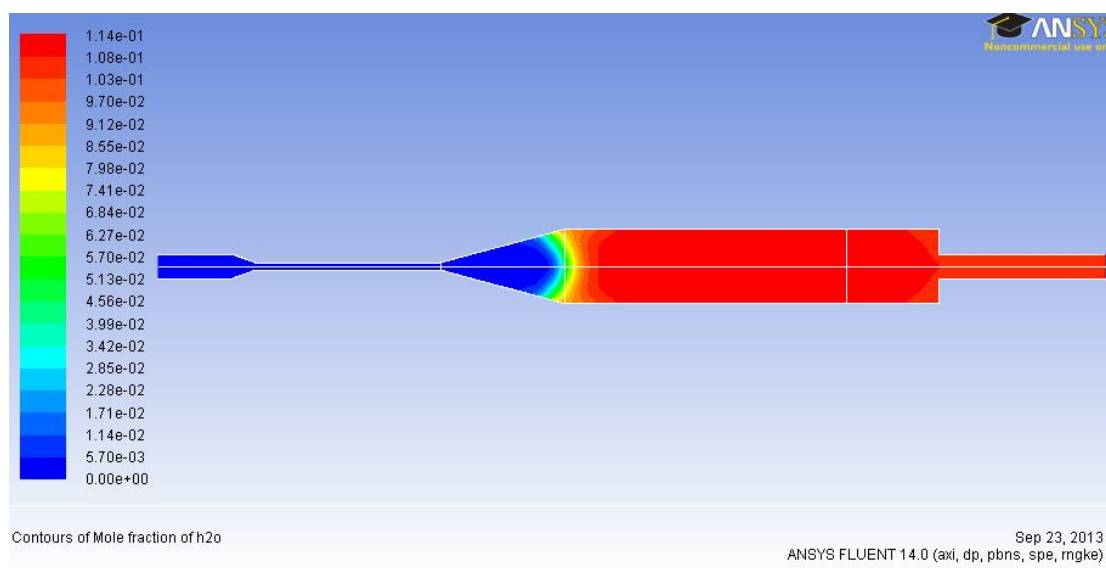
Σχ.5.6 Πεδίο κλάσματος όγκου CO_2 για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.42

Πίνακας 5.6	Τιμή κλάσματος μάζας% του CO_2 στην έξοδο
Προσομοίωση	2.72
Πείραμα	2.600±0.026



Σχ.5.7 Πεδίο κλάσματος όγκου CH_4 για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.42

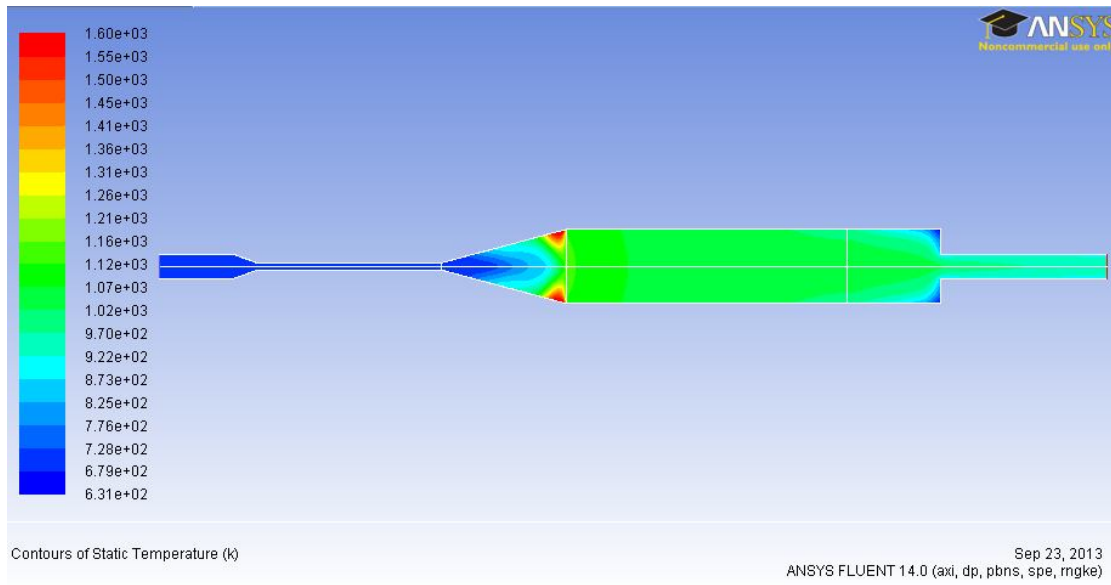
Πίνακας 5.7	Τιμή κλάσματος μάζας% του CH_4 στην έξοδο
Προσομοίωση	7.9
Πείραμα	5.262±0.053



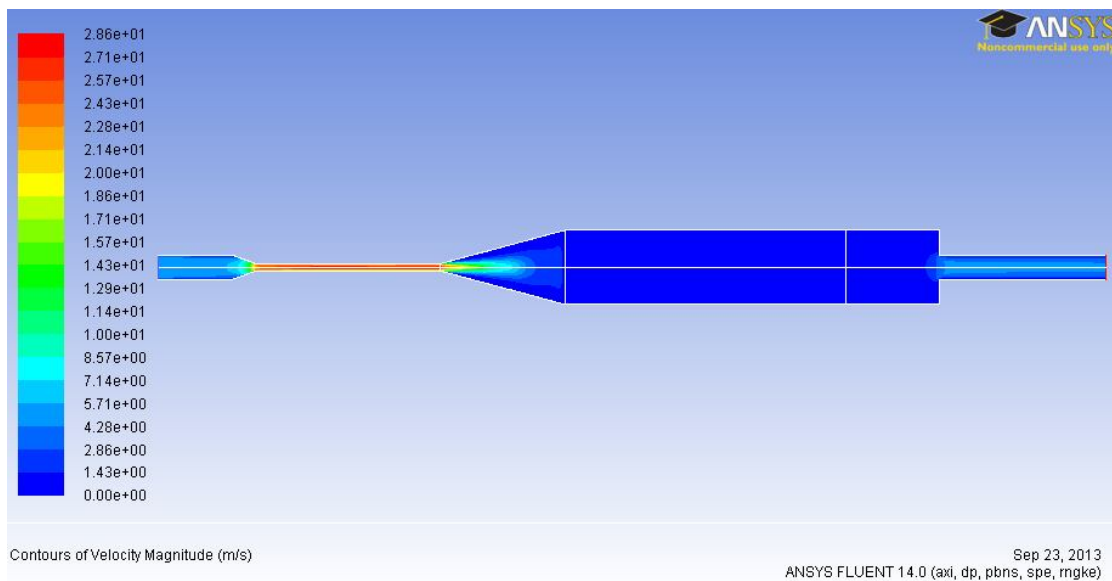
Σχ.5.8 Πεδίο κλάσματος όγκου H_2O για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.42

Πίνακας 5.8	Τιμή κλάσματος μάζας% του H_2O στην έξοδο
Προσομοίωση	10.83
Πείραμα	10.291±0.211

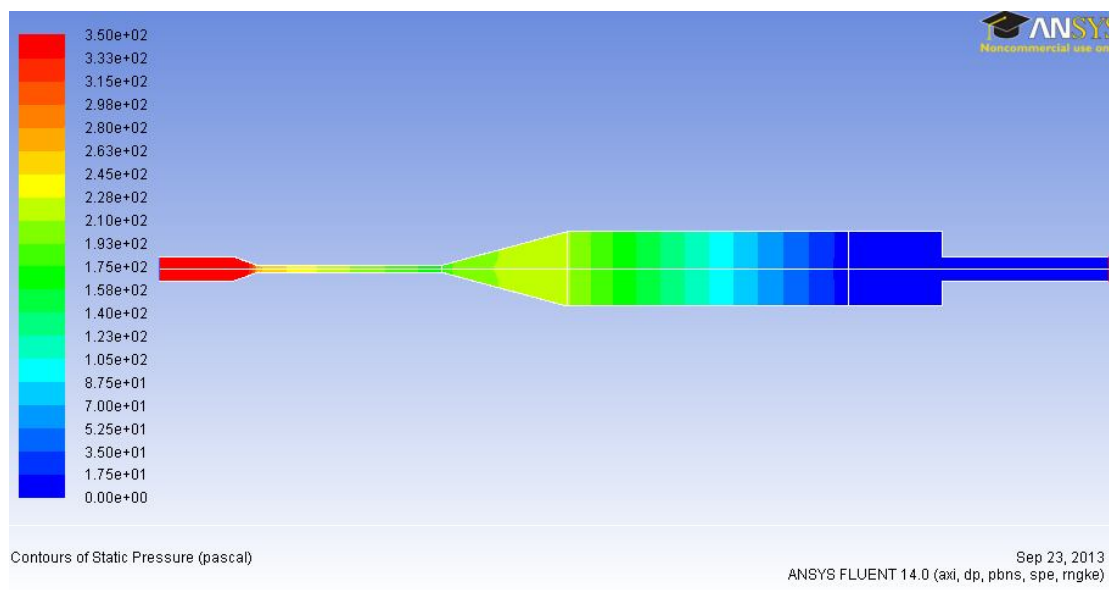
Περίπτωση: 1.5 kW και $\lambda=0.46$



Σχ.5.9 Πεδίο θερμοκρασίας για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.46

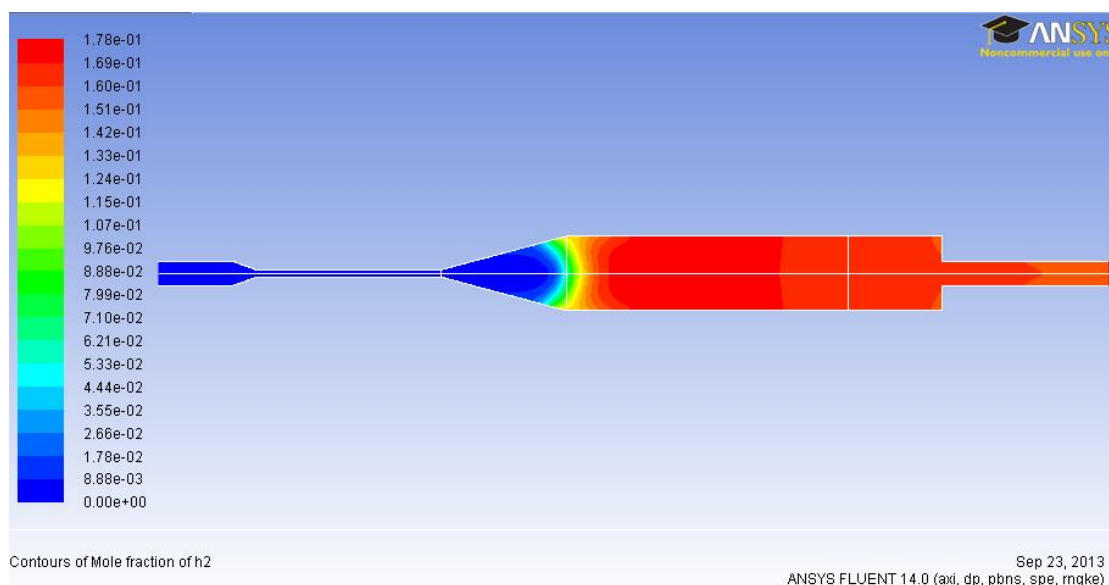


Σχ.5.10 Πεδίο ταχύτητας για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγος ισοδυναμίας αέρα 0.46



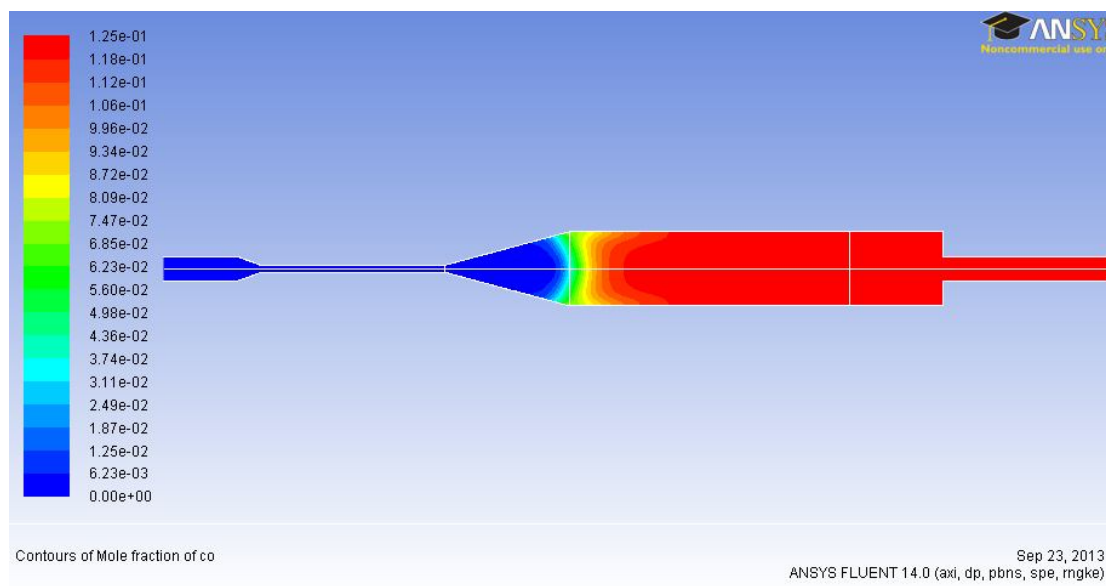
Σχ.5.11 Πεδίο πτώσης πίεσης για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.46

Πίνακας 5.9	Τιμή πτώσης πίεσης του soot trap [Pa]
Προσομοίωση	210.6
Πείραμα	252±2.02



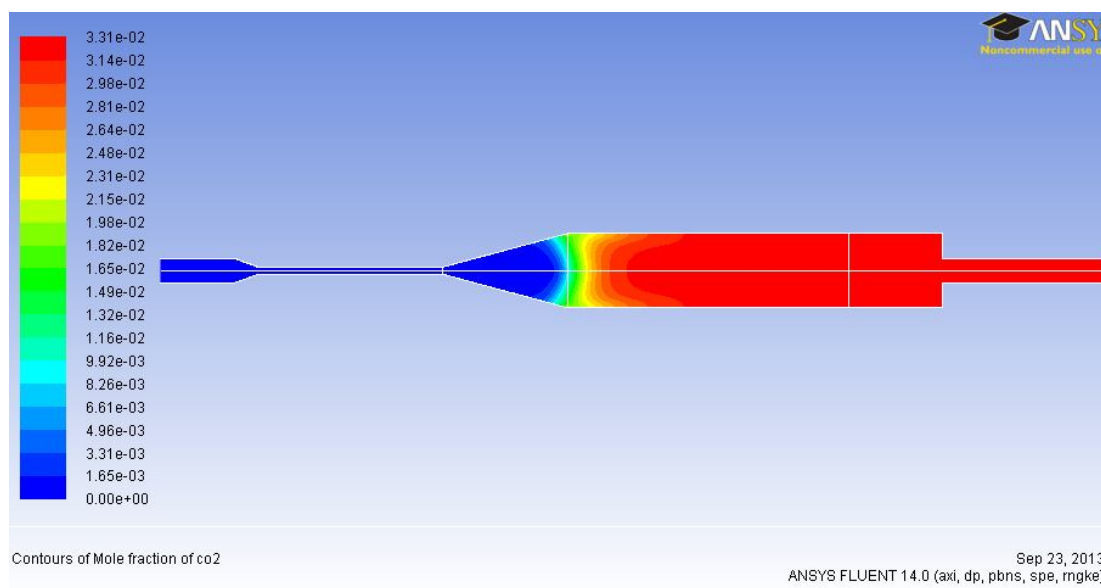
Σχ.5.12 Πεδίο κλάσματος όγκου H_2 για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.46

Πίνακας 5.10	Τιμή κλάσματος μάζας% του H_2 στην έξοδο
Προσομοίωση	16.00
Πείραμα	17.493±0.189



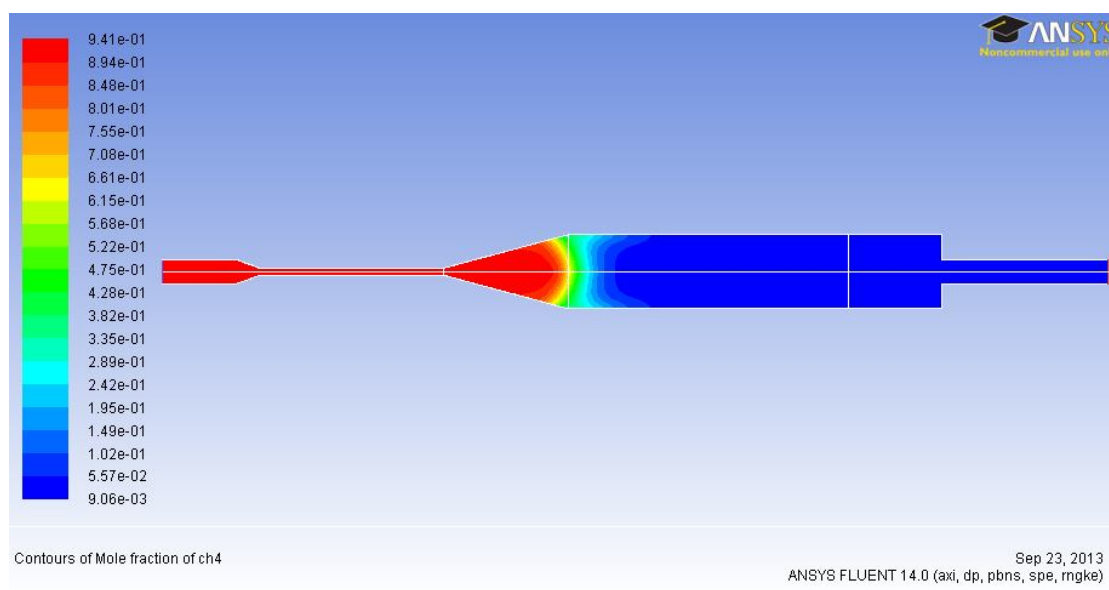
Σχ.5.13 Πεδίο κλάσματος όγκου CO για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.46

Πίνακας 5.11	Τιμή κλάσματος μάζας% του CO στην έξοδο
Προσομοίωση	12.45
Πείραμα	12.019±0.125



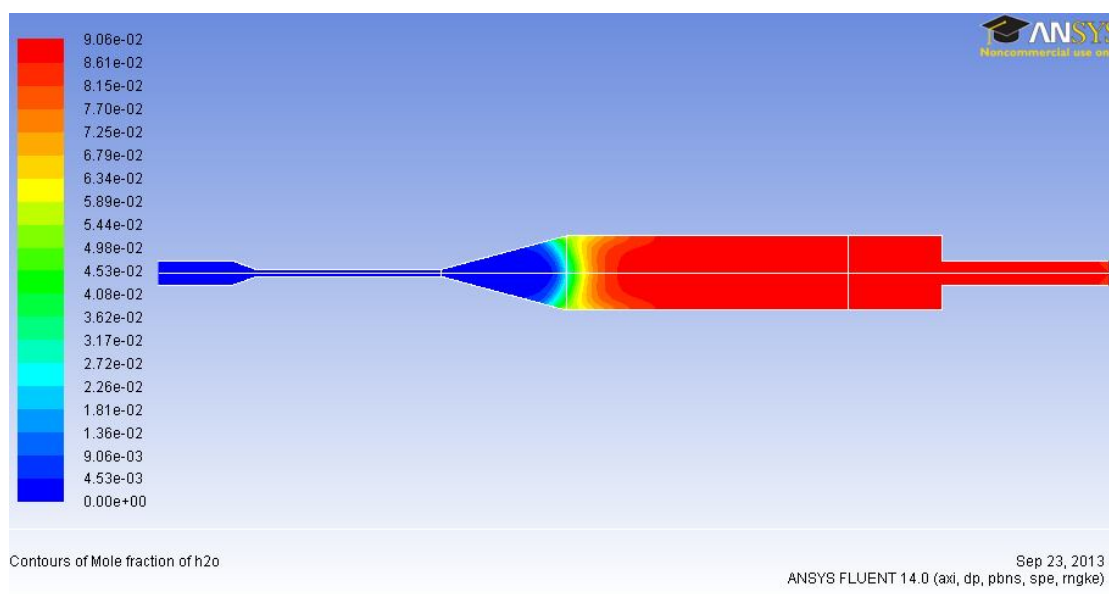
Σχ.5.14 Πεδίο κλάσματος όγκου CO_2 για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.46

Πίνακας 5.12	Τιμή κλάσματος μάζας% του CO_2 στην έξοδο
Προσομοίωση	3.3
Πείραμα	2.708±0.027



Σχ.5.15 Πεδίο κλάσματος όγκου CH_4 για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.46

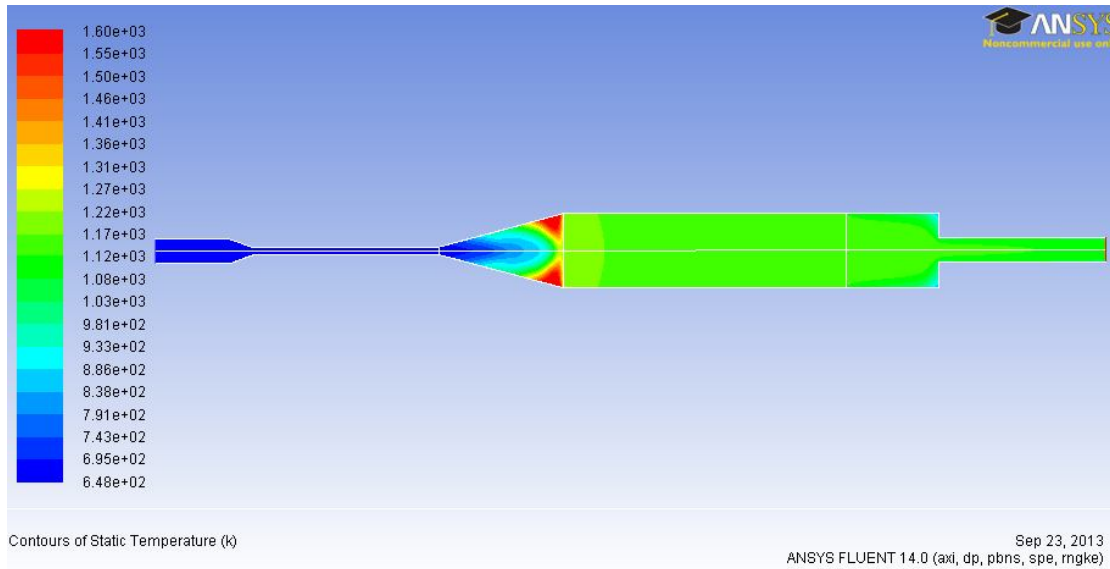
Πίνακας 5.13	Τιμή κλάσματος μάζας% του CH_4 στην έξοδο
Προσομοίωση	5.57
Πείραμα	2.535±0.027



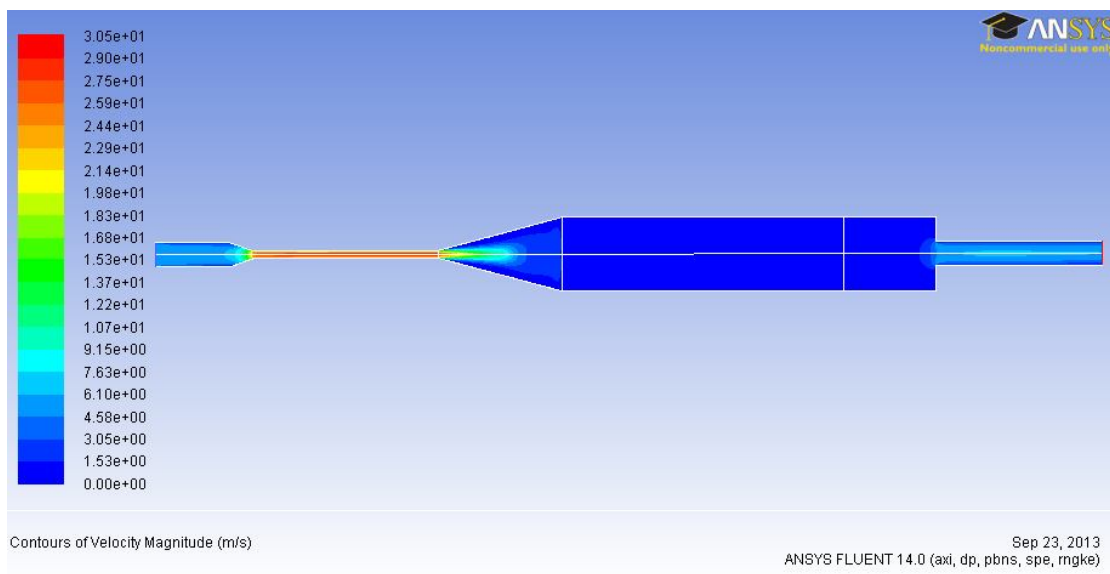
Σχ.5.16 Πεδίο κλάσματος όγκου H_2O για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.46

Πίνακας 5.14	Τιμή κλάσματος μάζας% του H_2O στην έξοδο
Προσομοίωση	9.05
Πείραμα	8.811±0.183

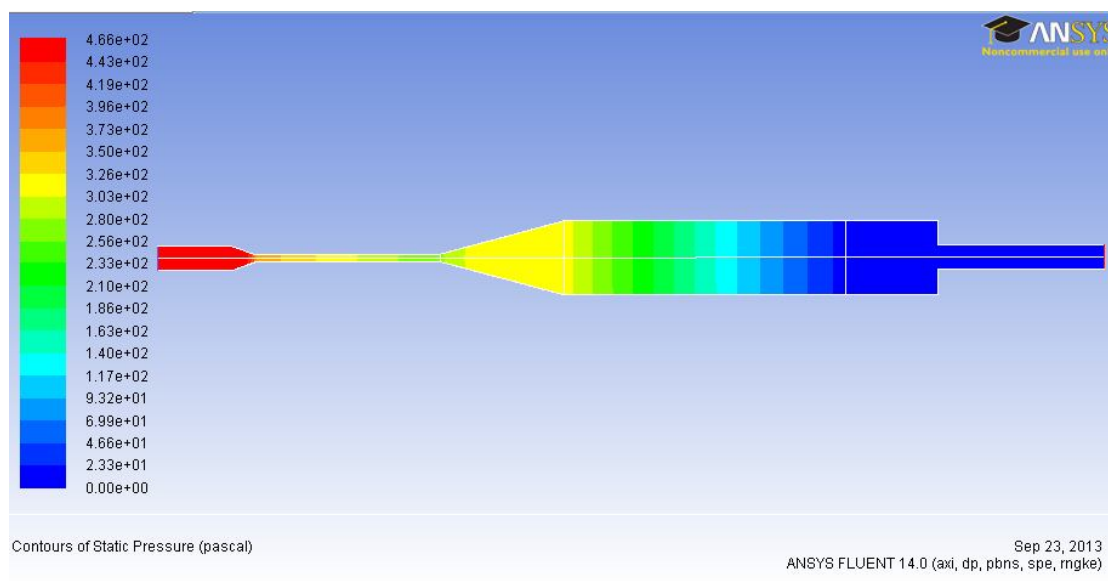
Περίπτωση: 1.5 kW και $\lambda=0.5$



Σχ.5.17 Πεδίο **θερμοκρασίας** για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.5

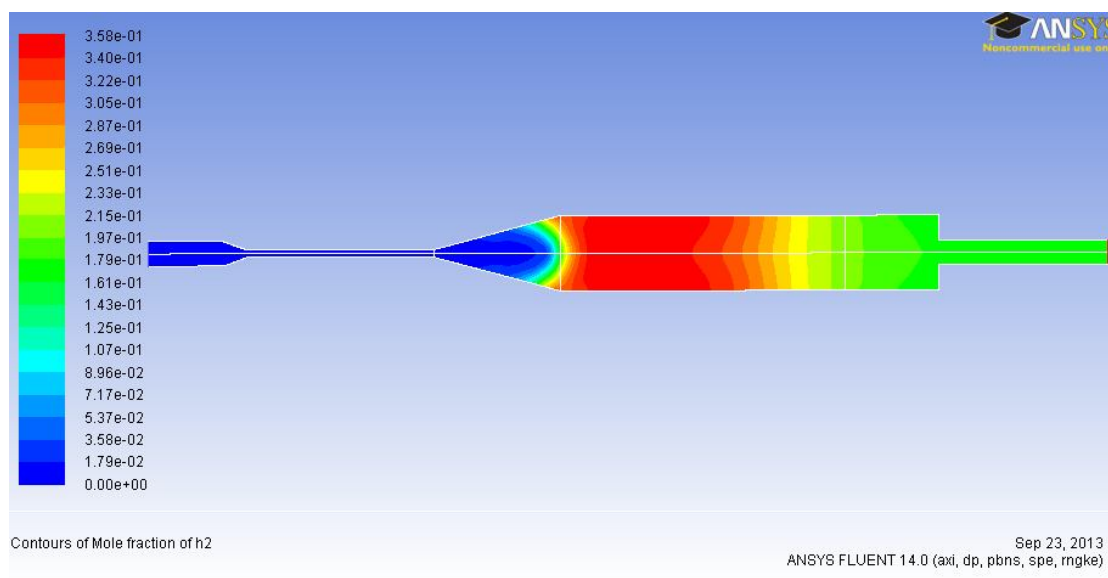


Σχ.5.18 Πεδίο **ταχύτητας** για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγος ισοδυναμίας αέρα 0.5



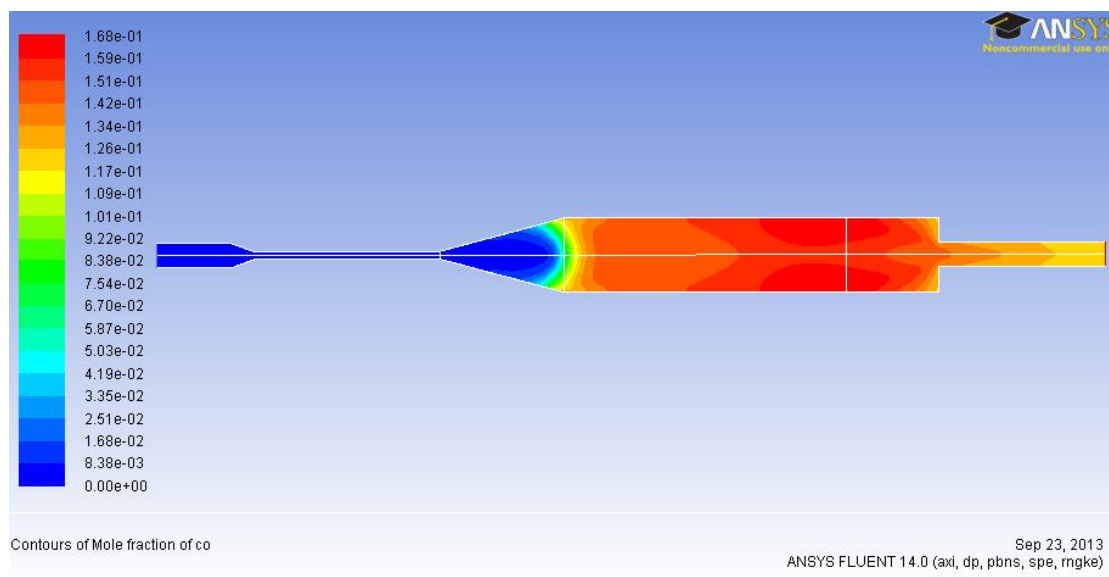
Σχ.5.19 Πεδίο πτώσης πίεσης για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.5

Πίνακας 5.15	Τιμή πτώσης πίεσης του soot trap [Pa]
Προσομοίωση	302.92
Πείραμα	262±2.10



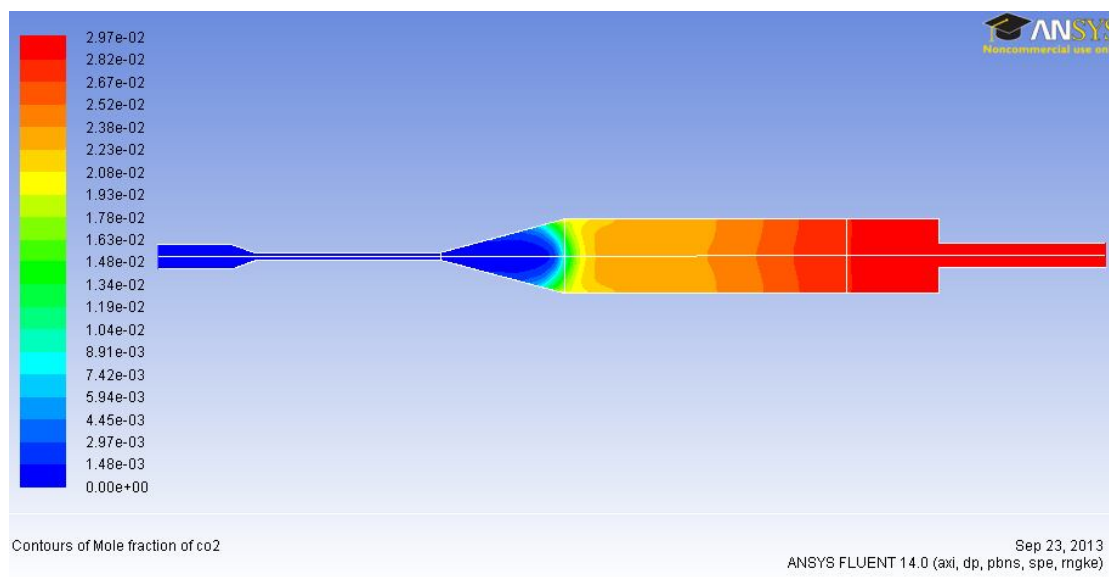
Σχ.5.20 Πεδίο κλάσματος όγκου H_2 για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.5

Πίνακας 5.16	Τιμή κλάσματος μάζας% του H_2 στην έξοδο
Προσομοίωση	17.92
Πείραμα	17.329±0.187



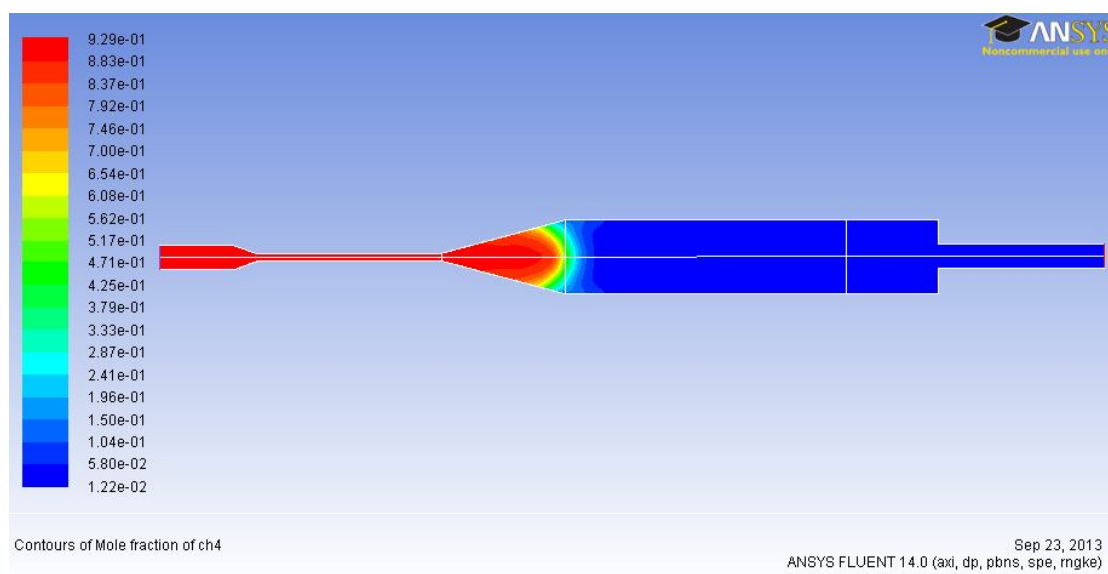
Σχ.5.21 Πεδίο κλάσματος όγκου CO για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.5

Πίνακας 5.17	Τιμή κλάσματος μάζας% του CO στην έξοδο
Προσομοίωση	12.57
Πείραμα	12.113±0.126



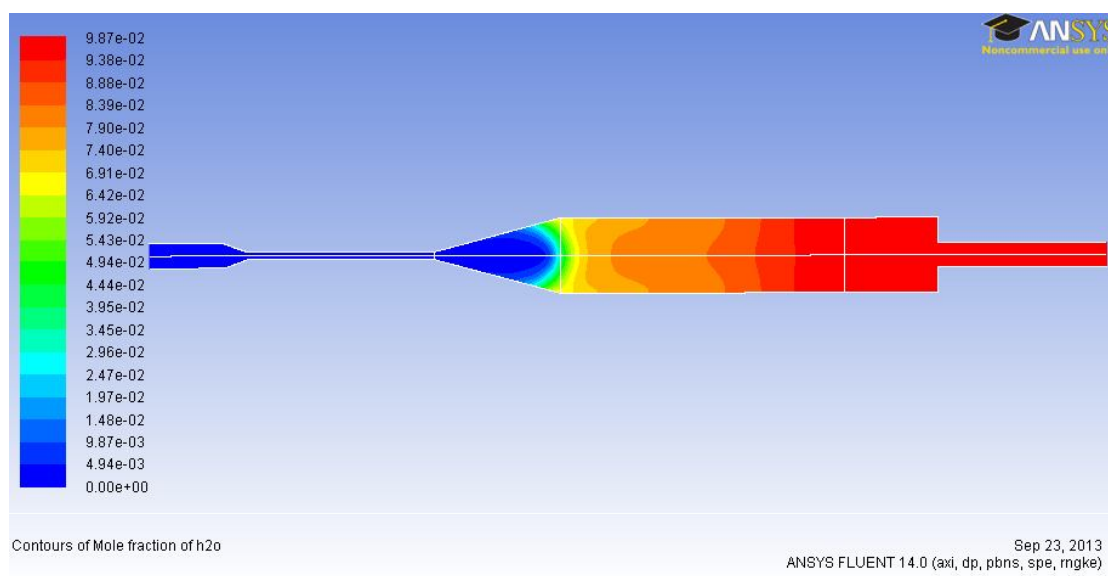
Σχ.5.22 Πεδίο κλάσματος όγκου CO₂ για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.5

Πίνακας 5.18	Τιμή κλάσματος μάζας% του CO ₂ στην έξοδο
Προσομοίωση	2.97
Πείραμα	2.946±0.030



Σχ.5.23 Πεδίο κλάσματος όγκου CH_4 για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.5

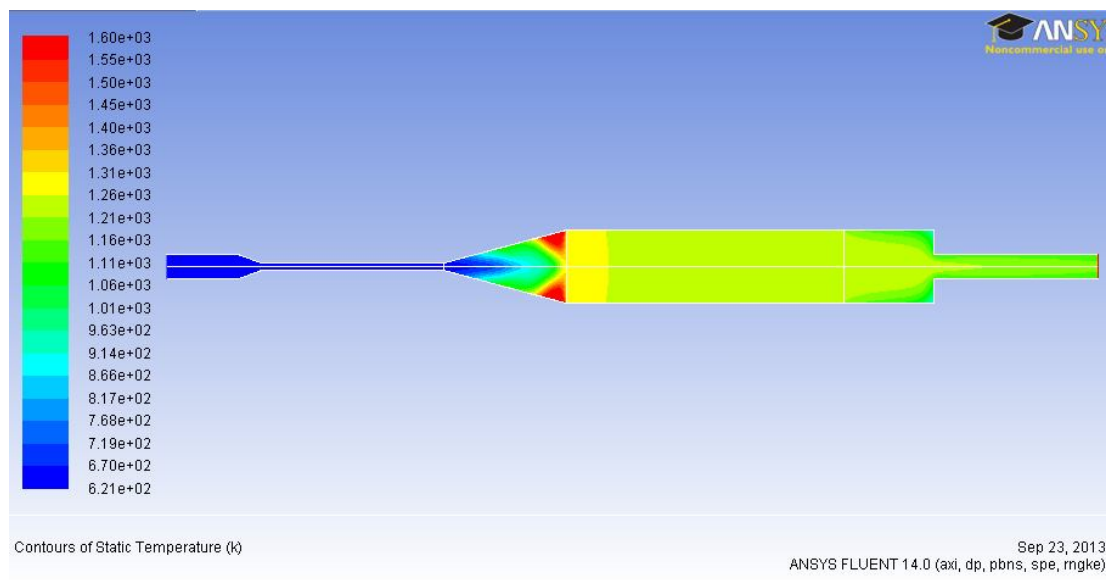
Πίνακας 5.19	Τιμή κλάσματος μάζας% του CH_4 στην έξοδο
Προσομοίωση	5.8
Πείραμα	1.621±0.016



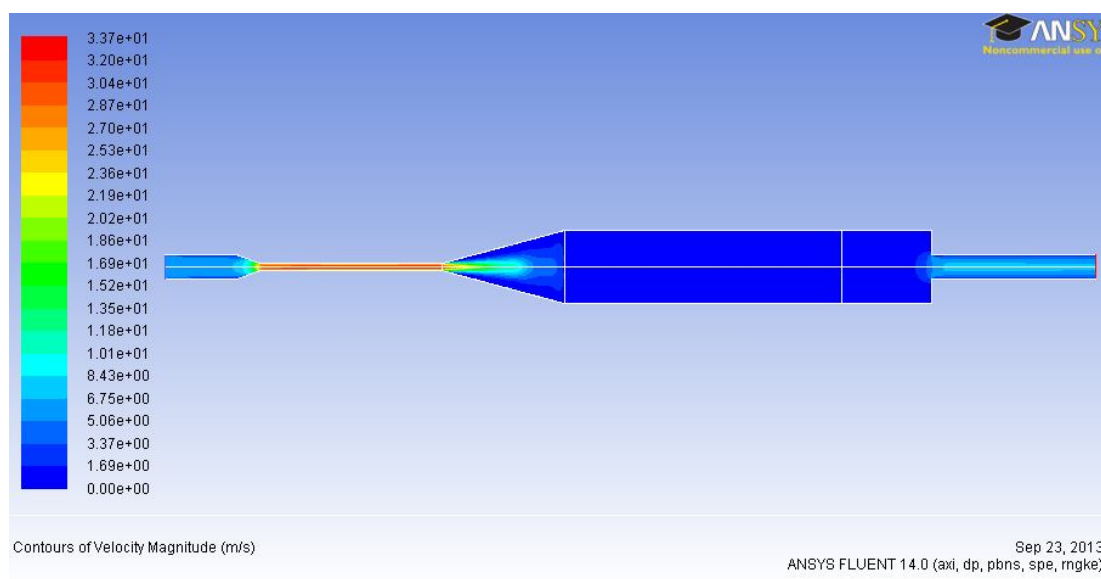
Σχ.5.24 Πεδίο κλάσματος όγκου H_2O για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.5

Πίνακας 5.20	Τιμή κλάσματος μάζας% του H_2O στην έξοδο
Προσομοίωση	9.87
Πείραμα	8.649±0.181

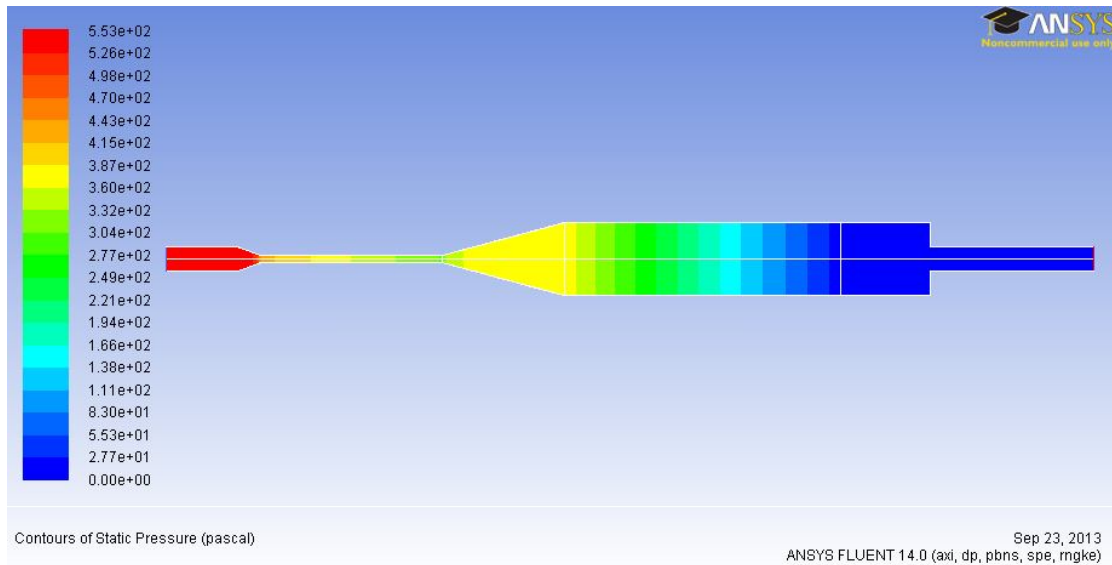
Περίπτωση: 1.5 kW and $\lambda=0.6$



Σχ.5.25 Πεδίο θερμοκρασίας για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.6

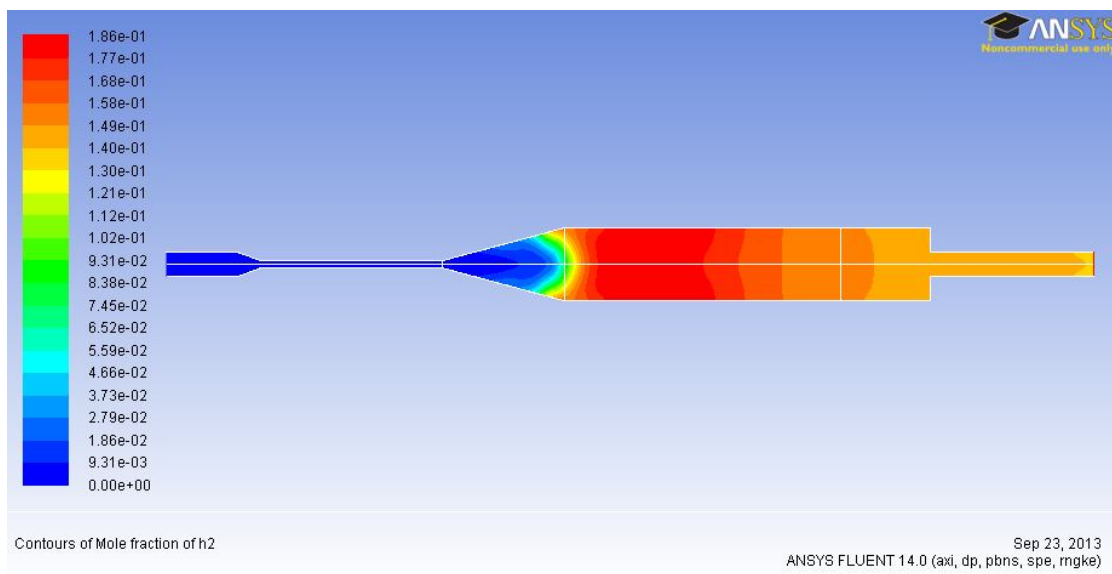


Σχ.5.26 Πεδίο ταχύτητας για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγος ισοδυναμίας αέρα 0.6



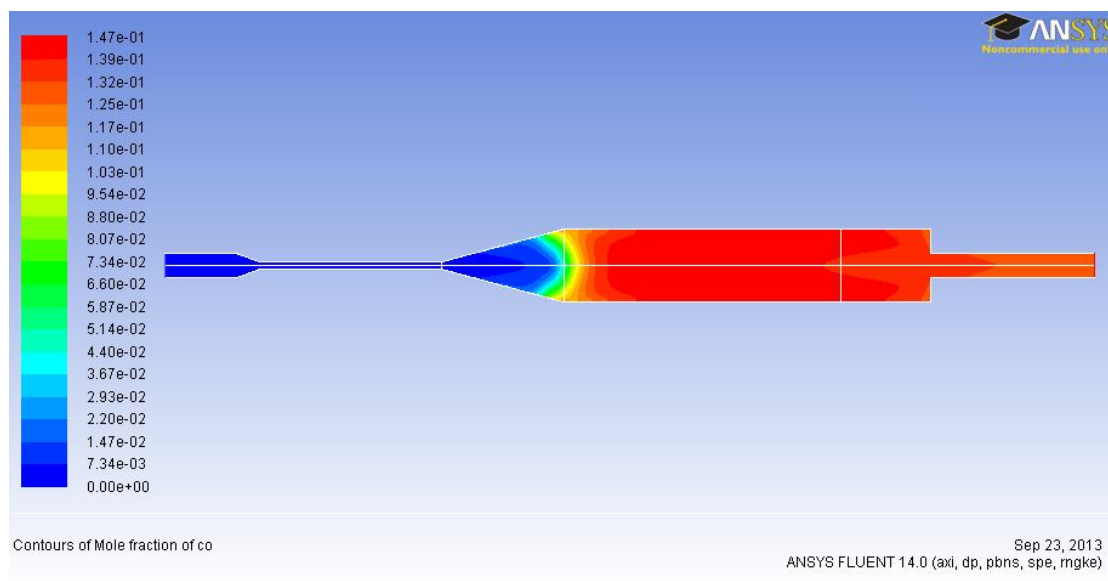
Σχ.5.27 Πεδίο πτώσης πίεσης για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.6

Πίνακας 5.21	Τιμή πτώσης πίεσης του soot trap [Pa]
Προσομοίωση	359.66
Πείραμα	308±2.46



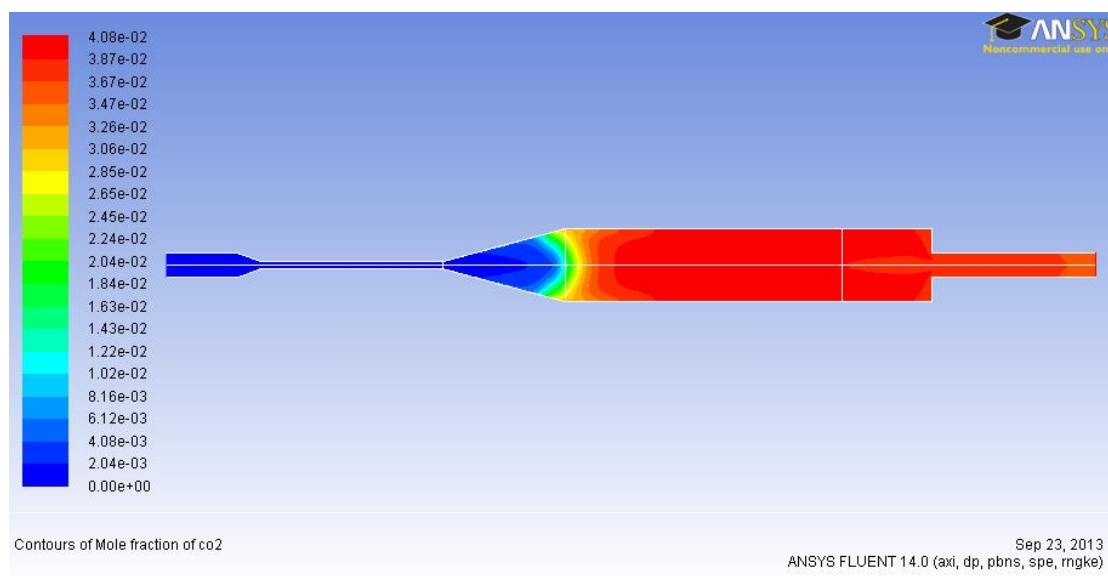
Σχ.5.28 Πεδίο κλάσματος όγκου H_2 για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.6

Πίνακας 5.22	Τιμή κλάσματος μάζας% του H_2 στην έξοδο
Προσομοίωση	14.9
Πείραμα	16.776±0.180



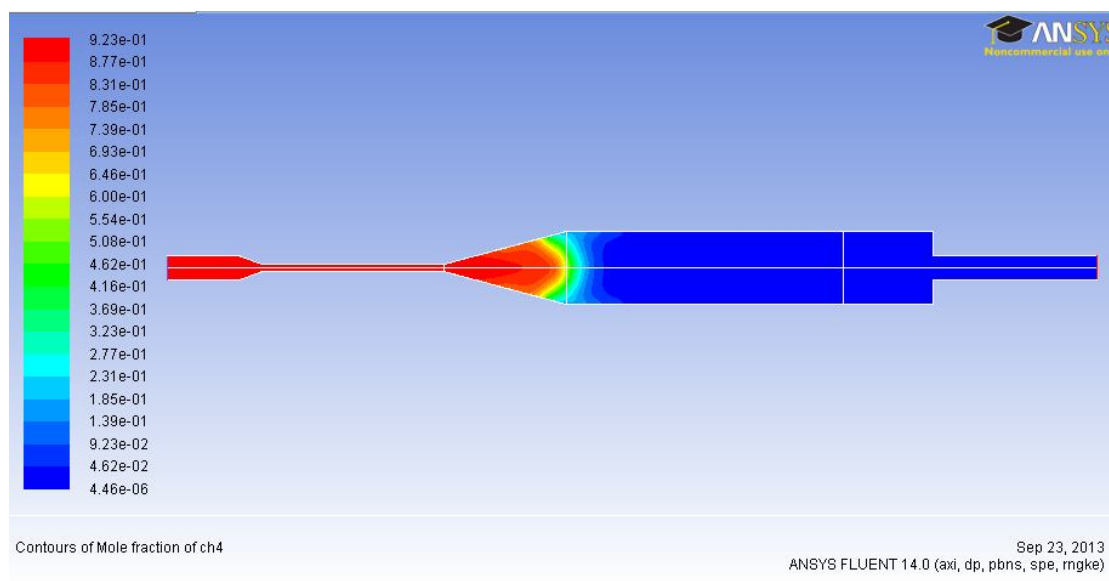
Σχ.5.29 Πεδίο κλάσματος όγκου CO για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.6

Πίνακας 5.23	Τιμή κλάσματος μάζας% του CO στην έξοδο
Προσομοίωση	13.2
Πείραμα	13.033±0.137



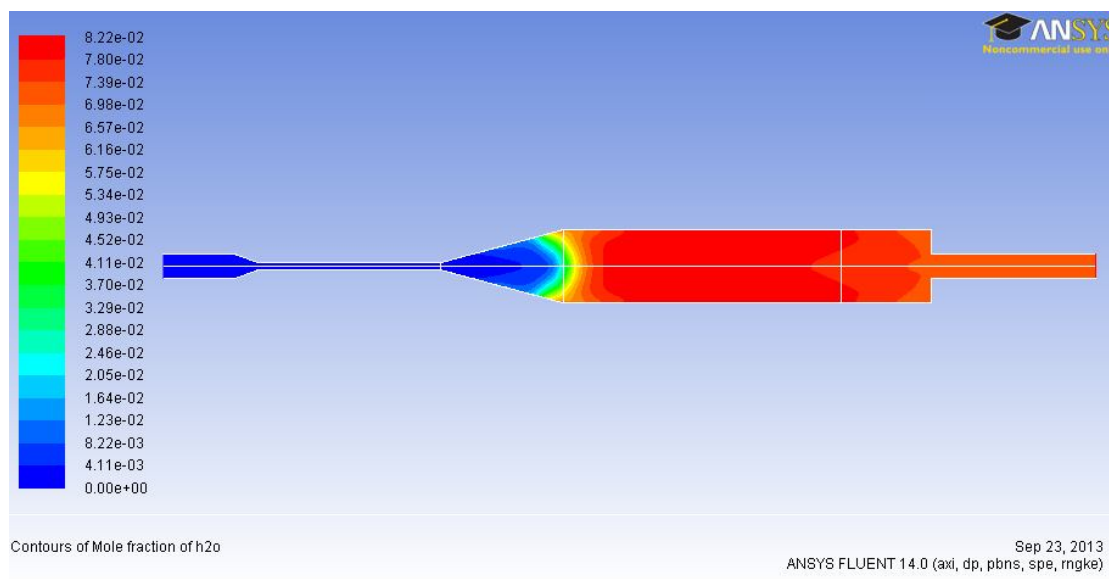
Σχ.5.30 Πεδίο κλάσματος όγκου CO_2 για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.6

Πίνακας 5.24	Τιμή κλάσματος μάζας% του CO_2 στην έξοδο
Προσομοίωση	3.67
Πείραμα	3.383±0.034



Σχ.5.31 Πεδίο κλάσματος όγκου CH_4 για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.6

Πίνακας 5.25	Τιμή κλάσματος μάζας% του CH_4 στην έξοδο
Προσομοίωση	4.61
Πείραμα	0.407 ± 0.004



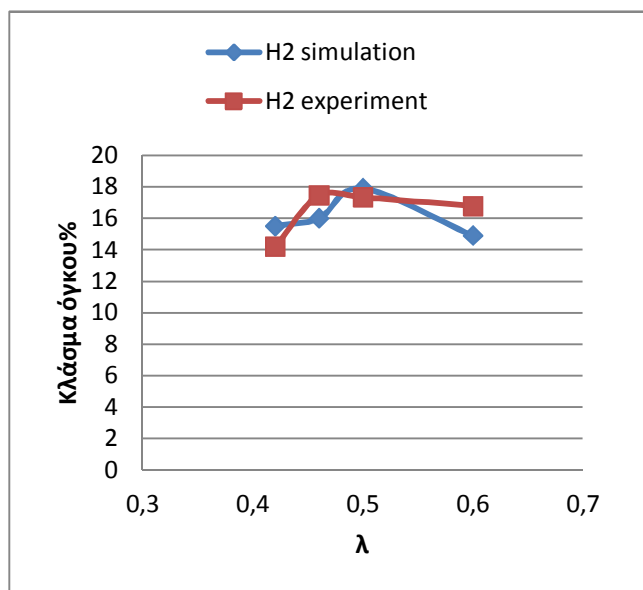
Σχ.5.32 Πεδίο κλάσματος όγκου H_2O για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.6

Πίνακας 5.26	Τιμή κλάσματος μάζας% του H_2O στην έξοδο
Προσομοίωση	7.39
Πείραμα	7.569 ± 0.160

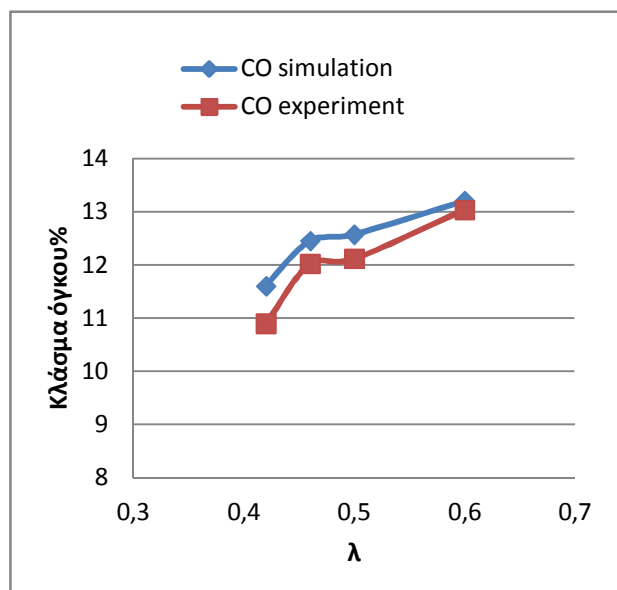
Διαγράμματα για σύγκριση των περιπτώσεων

Στα παρακάτω σχήματα παρουσιάζονται τα πειραματικά αποτελέσματα καθώς και αυτά της προσομοίωσης για το κάθε χημικό είδος και την πτώση πίεσης του soot trap. Η δειγματοληψία του καυσαερίου στο πείραμα έγινε στην έξοδο του αναμορφωτή και η τιμές της προσομοίωσης πάρθηκαν από το ίδιο ακριβώς σημείο στο μοντέλο.

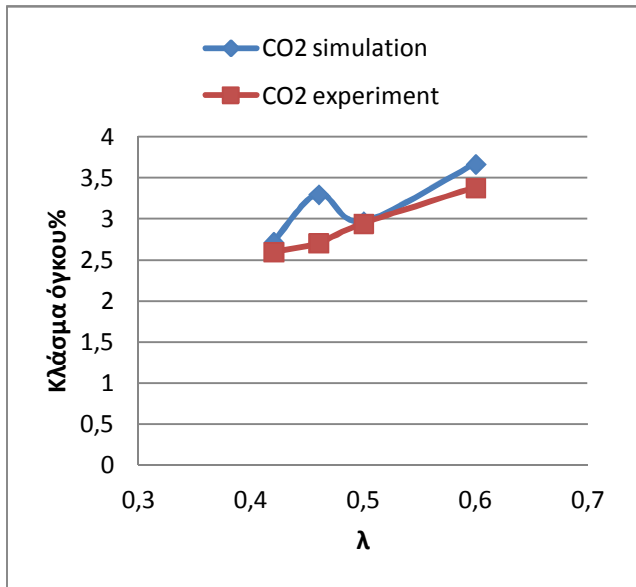
Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι ο μειωμένος χημικός μηχανισμός μπόρεσε να προσεγγίσει ικανοποιητικά τα κλάσματα όγκου των χημικών ειδών με εξαίρεση το μεθάνιο το οποίο φαίνεται αρκετά υπερεκτιμημένο. Αυτό μπορεί να αποδοθεί στο γεγονός ότι έλλειπα οι αντιδράσεις του C2 όπου είναι σημαντικές σε στοιχειομετρική καύση και εμπλέκεται σε αυτές η κατανάλωση του CH₄. Επίσης αυτός ο χημικός μηχανισμός όπως και οι περισσότεροι είναι βελτιστοποιημένη για υπερστοιχειομετρική ή στοιχειομετρική καύση. Επίσης πρέπει να παρατηρηθεί ότι η τάση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης προσεγγίζει σχετικά καλά την τάση των πειραματικών. Επίσης στο σχήμα 3.61 φαίνεται ότι η πτώση πίεσης στο soot trap, προσεγγίζοντας το ως porous packed bed είναι αρκετά κοντά μετά πειραματικά. Επίσης παρατηρήθηκε από όλα τα παραπάνω σχήματα, ότι η μη πραγματική γεωμετρία του soot trap επέτρεψε την σταθεροποίηση του μετώπου της φλόγας περισσότερο ανάντη.



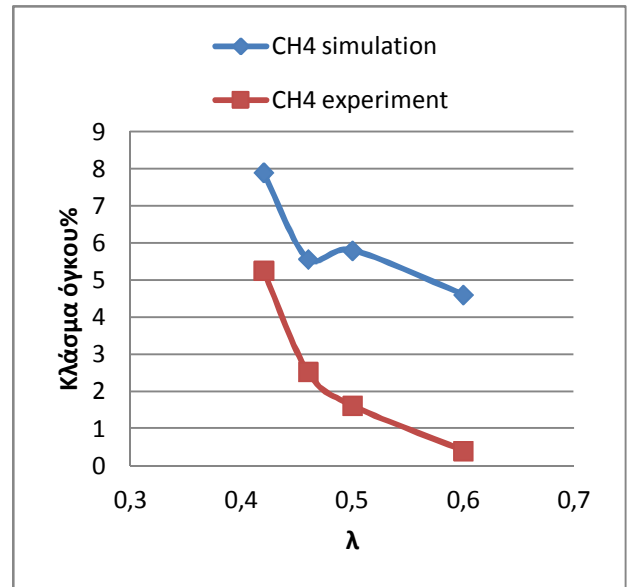
Σχ.5.33: Σύγκριση μεταξύ πειραματικών και αποτελεσμάτων προσομοίωσης του H₂, για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.42, 0.46, 0.5, 0.6



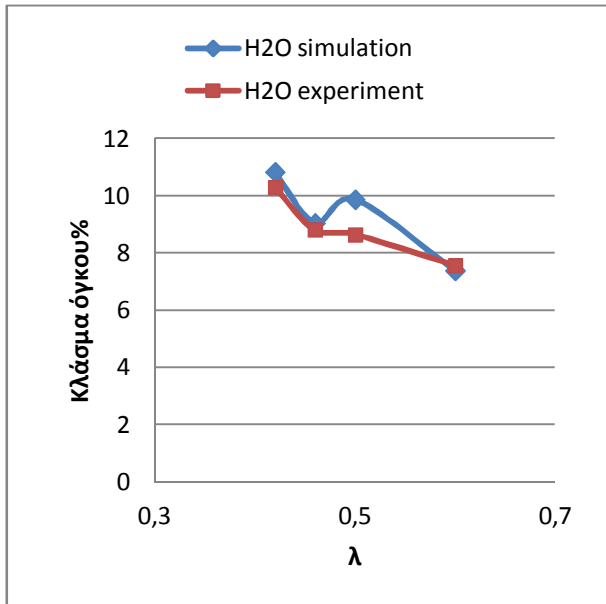
Σχ.5.34: Σύγκριση μεταξύ πειραματικών και αποτελεσμάτων προσομοίωσης του CO, για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.42, 0.46, 0.5, 0.6



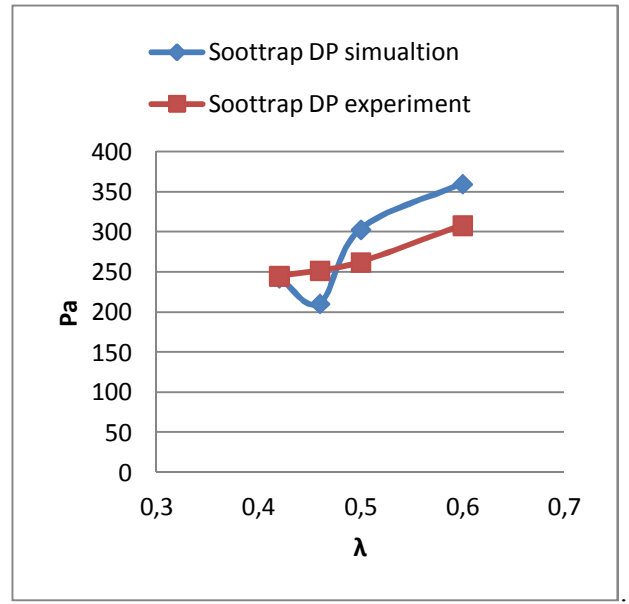
Σχ.5.35: Σύγκριση μεταξύ πειραματικών και αποτελεσμάτων προσομοίωσης του CO_2 , για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.42, 0.46, 0.5, 0.6



Σχ.5.36: Σύγκριση μεταξύ πειραματικών και αποτελεσμάτων προσομοίωσης του CH_4 , για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.42, 0.46, 0.5, 0.6



Σχ.5.37: Σύγκριση μεταξύ πειραματικών και αποτελεσμάτων προσομοίωσης του H_2O , για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.42, 0.46, 0.5, 0.6



Σχ.5.38: Σύγκριση μεταξύ πειραματικών και αποτελεσμάτων προσομοίωσης της **πτώσης πίεσης στο soot trap**, για θερμική ισχύ 1.5kW και λόγο ισοδυναμίας αέρα 0.42, 0.46, 0.5, 0.6



Κεφάλαιο 6^ο: Περίληψη, παρατηρήσεις και συμπεράσματα

Πειραματική και αριθμητική διερεύνηση θερμικής μερικής οξείδωσης μεθανίου σε αναμορφωτή καυσίμου βασισμένου σε ένα wall flow filter ή όπως αλλιώς καλείται soot trap, διενεργήθηκε στην παρούσα εργασία. Δεδομένου ότι τα χαρακτηριστικά της διαδικασίας αναμόρφωσης μπορούν να ενισχυθούν αν συμβαίνει μέσα σε πορώδεις κεραμικές δομές, όπως είναι αυτή του soot trap, πραγματοποιήθηκε αρχικά μια ανασκόπηση στην τεχνολογία υδρογόνου και ειδικότερα στις διαδικασίες αναμόρφωσης, ο ρόλος των πορωδών μέσων σε τέτοιες διαδικασίες και μία ανασκόπηση ερευνητικών εργασιών στις αρχές καύσης σε πορώδη μέσα.

Εν συνεχεία, προκαταρκτικές αριθμητικές προσομοιώσεις διενεργήθηκαν για την προετοιμασία του μοντέλου του αναμορφωτή. Σε αυτό το στάδιο διερευνήθηκε η δυνατότητα της προσομοίωσης πορώδους μέσου στο ANSYS. Δυο σημαντικά μεγέθη, το porosity και το particle porous diameter, χρειάστηκαν για τον υπολογισμό δύο συντελεστών που ήταν αναγκαίοι για την προσομοίωση πορώδους μέσου (ως porous packed bed) στο ANSYS. Επίσης μία παραμετροποίηση αυτών των μεγεθών έγινε στην συνέχεια προκειμένου να αποκαλυφθεί η επίδραση τους στο πεδίο ροής.

Ένα αλγεβρικό μοντέλο των Konstandopoulos & Johnson για την πρόβλεψη της πτώσης πίεσης στο soot trap μελετήθηκε στην συνέχεια. Από τον συνδυασμό των εξισώσεων του μοντέλου με την εξίσωση πτώσης πίεσης του ANSYS για porous packed bed, κατορθώθηκε να προσομοιωθεί το soot trap ως porous packed bed στο ANSYS όπου οι συντελεστές που χρειάζονται για την προσομοίωση βασίζονται στα πραγματικά χαρακτηριστικά του soot trap. Η δεύτερη αριθμητική προσομοίωση αυτής της διπλωματικής εργασίας, διενεργήθηκε με σκοπό να επαληθεύσει ότι οι προβλέψεις πτώσης πίεσης του μοντέλου των Konstandopoulos & Johnson είναι σε συμφωνία με τα αποτελέσματα της πτώσης πίεσης του porous packed bed στο ANSYS του οποίου οι συντελεστές υπολογίστηκαν με βάση τα χαρακτηριστικά του πραγματικού soot trap. Τα αποτελέσματα για μία ισόθερμη ροή αέρα στους 500°C και για 7, 27, 35 [lt/min] ογκομετρικές παροχές, έδειξαν να είναι αρκετά κοντά, ωστόσο για υψηλότερες ογκομετρικές παροχές, φάνηκε η τάση να αποκλίνουν.

Επιπλέον στην παρούσα εργασία, παρουσιάστηκαν αποτελέσματα από την πειραματική διερεύνηση ενός TPOX αναμορφωτή καυσίμου που βασίζεται σε ένα wall flow filter. Η γεωμετρία του αναμορφωτή σχεδιάστηκε ώστε να έχει μία σταθερή λειτουργία της TPOX αναμόρφωσης. Η γεωμετρία του αποτελούταν από δυο κομμάτια, ένα κωνικό το οποίο καθιστούσε δυνατή την αυτορρύθμιση της θέσης του μετώπου τη φλόγας ανάλογα με της συνθήκες και ένα κυλινδρικό όπου οι ενδόθερμες αντιδράσεις της αναμόρφωσης ελάμβαναν χώρα εσωτερικά του soot trap και ανάντη. Επίσης επιλέχθηκε μία μικρής διαμέτρου σωλήνα για την είσοδο των αντιδρώντων, στοχεύοντας με αυτών τον τρόπο στην αύξηση της ορμής τους ώστε να αποτραπεί πιθανότηταπισωγυρίσματος της φλόγας (flash back), δεδομένου ότι οι ταχύτητες των πειραμάτων θα ήταν χαμηλές λόγω χαμηλών θερμικών ισχύων που θα δοκιμάζονταν εξαιτίας του μικρού μεγέθους του αναμορφωτή. Το ίδιο σχέδιο του αναμορφωτή κατασκευάστηκε δύο φορές, διότι τα πειράματα έγιναν σε δύο στάδια.



Στο πρώτο στάδιο των πειραμάτων εξετάστηκε το εύρος λειτουργίας του σχεδιασμένου αναμορφωτή καθώς καταγράφηκαν επίσης τα θερμοκρασιακά προφίλ, οι συγκεντρώσεις των χημικών ειδών του καυσαερίου, η πτώση πίεσης στον αναμορφωτή και στα άκρα του soot trap. Τα θερμοκρασιακά προφίλ αποκάλυψαν σταθεροποίηση της φλόγας εντός του κωνικού τμήματος για θερμικές φορτίσεις 1,5 με 2 kW, το αποδιδόμενο υδρογόνο έφτασε το ποσοστό του 20% στο ξηρό μίγμα, και του μονοξειδίου στο 14% για θερμική φόρτιση 1,5kW και για λόγο ισοδυναμίας αέρα σε ένα εύρος από 0,45 μέχρι 0,52.

Στο δεύτερο στάδιο των πειραμάτων διερευνήθηκαν εμφάνιση παραγωγής αιθάλης (soot point) και η αναγέννηση της, κυρίως για θερμική ισχύ 1,5kW και για λόγο ισοδυναμίας αέρα σε ένα εύρος από 0,4 μέχρι 0,6. Επιπλέον σε αυτό το στάδιο ενσωματώθηκε ένα σύστημα δειγματοληψίας καυσαερίου που αποσκοπούσε στη μέτρηση συγκεντρώσεων σωματιδίων της αιθάλης. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι το soot point εμφανίστηκε για λόγο ισοδυναμίας αέρα 0,42 και θερμοκρασία περίπου 1200°C όπου στο soot trap συσσωρεύτηκε αιθάλη. Η πτώση πίεσης του ήταν μία έμμεση ένδειξη αυτής της συσσώρευσης. Μία επίσης ένδειξη ήταν πτώσης συγκέντρωσης της ασετιλίνης στα καυσαέρια, διότι θεωρείται ότι λαμβάνει χώρα σε ένα μηχανισμό αντιδράσεων όπου καταναλώνεται προς παραγωγή αιθάλης. Η αναγέννηση του άνθρακα παρατηρήθηκε για λόγο ισοδυναμίας αέρα 0,5 και θερμοκρασία περίπου 1300°C, κάτι το οποίο αποτυπώθηκε σε όλες της μετρήσεις εκείνης της στιγμής. Η πτώση πίεσης στο soot trap μειώθηκε, συγκέντρωση των μετρούμενων σωματιδίων αυξήθηκε λόγω της διάλυσης των συσσωματωμάτων της αιθάλης, και επιπλέον φάνηκε η ενεργοποίηση των αντιδράσεων Boudouard δεδομένου ότι η συγκέντρωση του νερού μειώθηκε. Επίσης, στο στάδιο της αναγέννησης είχαμε τις μέγιστες εκπομπές σωματιδίων $3,33 \cdot 10^9$ [particles/cm³], η μέτρηση του κλασμάτων όγκου έφτασε το 20% για το υδρογόνο και 13,5% για το μονοξείδιο του άνθρακα στο ξηρό μίγμα, όπως περίπου και στο πρώτο στάδιο των πειραμάτων. Η ποσότητα του νερού και επομένως και το υγρό μίγμα, υπολογίστηκαν από την ισορροπία του οξυγόνου. Αναφορικά με την αποδοτικότητα του αναμορφωτή, έφτασε το 47% για θερμική ισχύ 1,5kW και 0,5 λόγο ισοδυναμίας αέρα σε συνθήκες λειτουργίας που δεν είχε παραχθεί ακόμα αιθάλη. Στην συνέχεια φτάνοντας στο soot point για λόγο ισοδυναμίας αέρα 0,42 η αποδοτικότητα μειώθηκε για να αυξηθεί ξανά στο 56% κατά την διάρκεια της αναγέννηση και λόγω ισοδυναμίας αέρα 0,6. Αυτό μπορεί πιθανόν να εξηγηθεί από την περισσότερη παραγωγή υδρογόνου και μονοξειδίου του άνθρακα από την ενεργοποίηση των αντιδράσεων Boudouard.

Τα παραπάνω αποτελέσματα σχετικά με την αποδοτικότητα έδειξαν ότι είναι αξιοσημείωτα, λαμβάνοντας υπόψη ότι δεν δοκιμάστηκαν καθόλου υψηλότερες θερμικές φορτίσεις λόγω του περιορισμού του μικρού μεγέθους του αναμορφωτή. Υψηλότερες θερμικές φορτίσεις θα μπορούσαν να οδηγήσουν σε χαμηλότερους λόγους ισοδυναμίας την εμφάνιση του soot point και σε συνδυασμό με έναν βελτιστοποιημένο σχεδιασμό του αναμορφωτή να τον καθιστούσε ανταγωνιστικό στην απόδοση, δεδομένου ότι σχεδιασμένοι αναμορφωτές με πορώδο μέσα όπως στο [1] έχουν απόδοση 62%. Επομένως τα προαναφερθέντα θα μπορούσαν να αποτελούν μελλοντικές προοπτικές προς διερεύνηση.

Στην τρίτη αριθμητική μελέτη αυτής της διπλωματικής εργασίας προσομοιώθηκε η χημική κινητική σε ένα μοντέλο του αναμορφωτή. Το πεδίο το οποίο αναπαριστούσε το soot trap δεν είχε την αληθινή γεωμετρία του παρ' όλα αυτά έγινε προσπάθεια να προσομοιωθεί η πραγματική πτώση πίεσης σύμφωνα με τα προαναφερθέντα της δεύτερης προσομοίωσης. Οι θερμικές απώλειες δεν υπολογίστηκαν με λεπτομέρεια αλλά έγινε προσπάθεια να



προσεγγιστούν από την σύγκριση των θερμοκρασιακών προφίλ προσομοίωσης και πειράματος. Ένας μειωμένος χημικός μηχανισμός 19 χημικών ειδών εισήχθη επίσης. Οι περιπτώσεις οι οποίες προσομοιώθηκαν ήταν για λόγους ισοδυναμίας αέρα 0,42, 0,46, 0,5, 0,6 και θερμική ισχύ 1,5kW. Τα αποτελέσματα των χημικών ειδών συγκρίθηκαν με τα πειραματικά και παρατηρήθηκε καλή προσαρμογή με εξαίρεση το μεθάνιο το οποίο είχε υπερτιμηθεί. Αυτό μπορεί να αποδοθεί στο γεγονός ότι ο μειωμένος χημικός μηχανισμός που χρησιμοποιήθηκε, δεν περιείχε αντιδράσεις του C2 και δεδομένου ότι η καύση ήταν υποστοιχειομετρική αυτές οι αντιδράσεις θα έπρεπε να υπάρχουν. Επίσης η περισσότερη μηχανισμοί όπως και αυτός είναι βελτιστοποιημένοι για στοιχειομετρική και υπερστοιχειομετρική καύση. Επομένως σε μελλοντική εργασία ένας μεγαλύτερος μηχανισμός θα μπορούσε να εισαχθεί και ένας πιο ακριβής υπολογισμός στις θερμικές απώλειες θα μπορούσε να διενεργηθεί. Σχετικά με τα αποτελέσματα της πτώσης πίεσης από την προσομοίωση στο soot trap έδειξαν μία ικανοποιητική προσαρμογή με τα πειραματικά. Αν και ο τρόπος με τον οποίο προσομοιώθηκε το soot trap είχε το μειονέκτημα της μη αληθινής γεωμετρίας και επομένως μη πραγματικούς χρόνους παραμονής της ροής στο πεδίο του soot trap. Ωστόσο αυτή η προσέγγιση προσομοίωσης θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί σε μελλοντική δουλειά σε κάτι που ήταν αρχική ιδέα για την παρούσα διπλωματική αλλά δεν πραγματοποιήθηκε. Το πρώτο βήμα θα ήταν προσομοίωση της χημικής κινητικής στο κωνικό τμήμα του αναμορφωτή. Αυτό θα απαιτούσε κατάντη ένα πραγματικό μέτωπο πίεση του οποίου το μέγεθος θα εξαρτιόταν από τα πραγματικά χαρακτηριστικά του soot trap, κάτι το οποίο έχει επιτευχθεί σε αυτή την διπλωματική εργασία. Σε ένα δεύτερο βήμα μία συμμετρική γεωμετρία ενός καναλιού του soot trap θα χρησιμοποιούσε τα αποτελέσματα εξόδου του κωνικού τμήματος ως είσοδο, για μία δεύτερη προσομοίωση που θα στόχευε στην μελέτη της ροής και χημικής κινητικής μέσα στο soot trap.



Αναφορές

- [1] Experimental study of hydrogen production and soot particulate matter emissions from rich-combustion in inert porous media (Alexandra Loukou et al. 2012)
- [2] Experimental analysis of soot abatement in reducing syngas for high temperature fuel cell feeding (A. Raimondi et al. 2011)
- [3] Hydrogen production by thermal partial oxidation of hydrocarbon fuels in porous media based reformer (Z. Al-Hamamre et al. 2008)
- [4] New concept for soot removal from a syngas mixture (A. Raimondi et al. 2009)
- [5] Flame stabilization of highly diffusive gas mixtures in porous inert media (Trimis and Wawrzinek 2003)
- [6] Detailed kinetic modelling of the T-POX reforming process using a reactor network approach (G. Vourliotakis et al. 2008)
- [7] Quasi-1D and 3D TPOX porous media diffuser reformer model (J.M.C Pereira et al. 2010)
- [8] Heat transfer characteristics of a porous radiant burner under the influence of a 2-D radiation field (Prabal Talukdar et al. 2004)
- [9] Hydrogen production from rich combustion in porous media (H. Pedersen-Mjaanes et al. 2004)
- [10] Theoretical analysis of porous radiant burners under 2-D radiation field using discrete ordinates method (Keshtkar and Nassab 2009)
- [11] Turns, S.R. “An Introduction to Combustion”, McGraw-Hill, 2000
- [12] Spalding, D.B. “Combustion and Mass Transfer”, Pergamon Press, 1978
- [13] Glassman, I. “Combustion”, 3rd Ed., Academic Press, 1996
- [14] Kuo, K.K. “Principles of Combustion”, Wiley, 1984
- [15] Di Huang, 2011, *Modeling of Diesel Particulate Filter Filtration and regeneration for transient driving schedules*, Michigan Technological University, 75 p.
- [16] Modeling reacting flows with ANSYS CFD
[http://www.ansys.com/Resource+Library/Webinars/Modeling+Reacting+Flows+with+ANSYS+CFD+\(Part+-+3\)](http://www.ansys.com/Resource+Library/Webinars/Modeling+Reacting+Flows+with+ANSYS+CFD+(Part+-+3))
- [17] <http://www.me.berkeley.edu/drm/#performance> Reduced Reaction Sets based on GRI-Mech 1.2, University of California at Berkeley (Andrei Kazakov and Michael Frenklach)



- [18] "Systematic Development of Reduced Reaction Mechanisms for Dynamic Modeling," M. Frenklach, K. Kailasanath and E. S. Oran, *Progress in Astronautics and Aeronautics* **105**(2), 365-376 (1986).
- [19] "Detailed Reduction of Reaction Mechanisms for Flame Modeling," H. Wang and M. Frenklach, *Combust. Flame* **87**, 365-370 (1991).
- [20] "Reduction of Chemical Reaction Models," M. Frenklach, in *Numerical Approaches to Combustion Modeling* (E. S. Oran and J. P. Boris, Eds.), Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 135, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Washington, D.C., 1991, pp. 129-154.
- [21] K. Siegmann, K. Sattler, and H.C. Siegmann: Clustering at high temperatures: carbon formation in combustion, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, Vol. 126, p. 191-202, 2002.
- [22] M.S. Skjoth-Rasmussen: Modelling of Soot Formation in Autothermal Reforming, Ph.D. Thesis, Kongens Lyngby, 2003.
- [23] H. Bockhorn: Soot Formation in Combustion, Mechanisms and Models, Springer Verlag, 1994.
- [24] Michael Frenklach: Reaction mechanisms of soot formation in flames, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, Vol. 4, p. 2028-2037, 2002.
- [25] H.F. Calcote and R.J. Gill in Soot Formation and Combustion, Mechanisms and Models, H. Bockhorn (ed.), Springer-Verlag, Berlin, p. 442, 1994.
- [26] H. Richter and J.B. Howard: Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons and their growth to soot—a review of chemical reaction pathways, *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 26, p. 565–608, 2000.
- [27] P.A. Baron and K. Willeke: Aerosol measurement; Principles, Techniques, and Applications, second edition, Wiley-Interscience, 2001.
- [28] H. Burtscher: Physical characterization of particulate emissions from diesel engines: a review, *Aerosol Science*, Vol. 36, p. 896-932, 2005.
- [29] A. De Filippo, L.A. Sgro, G. Lanzaolo, and A. D'Alessio: Probe measurement and numerical model predictions of evolving size distributions in premixed flames, *Combustion and Flame*, Vol. 156, p. 1744-1754, 2009.
- [30] Ch. Asbach, H. Kaminski, H. Fissan, Ch. Monz, D. Dahmann, S. Mülhopt, H.R. Paur, H.J. Kiesling, F. Herrmann, M. Voetz, T. A. J. Kuhlbusch: Comparison of four mobility particle sizers with different time resolution for stationary exposure measurements, *Journal Nanopart. Res.*, Vol. 11, p.1593–1609, Springer, 2009.



- [31] Ü.Ö. Köylü, C.S. McEnally, D.E. Rosner, and L.D. Pfefferle: Simultaneous Measurements of Soot Volume Fraction and Particle Size / Microstructure in Flames Using a Thermophoretic Sampling Technique, *Combustion and Flame*, Vol. 110, p. 494-507, 1997.
- [32] H. Hepp and K. Siegmann: Mapping of Soot Particles in a Weakly Sooting Diffusion Flame by Aerosol Techniques, *Combustion and Flame*, Vol. 115, p. 275–283, 1998.
- [33] M.M. Maricq: Size and charge of soot particles in rich premixed ethylene flames, *Combustion and Flame*, Vol. 137, p. 340–350, 2004.
- [34] S. J. Harris and M. M. Maricq: Signature size distributions for diesel and gasoline engine exhaust particulate matter, *Aerosol Science*, Vol. 32, p. 749-764, 2001.
- [35] Aerosol Instrument Manager, Software for Scanning Mobility Particle Sizer TM (SMPSTM) Spectrometer, User's Manual, P/N 1930038, Revision G, October 2006.
- [36] Diploma thesis with the topic: Study on the influence of water addition on the characteristics of thermal partial oxidation. Technical University Bergakademie Freiberg(Isabel Frenzel, 2010)
- [37] J.S. Bhatt and R.P. Lindstedt: Analysis of the impact of agglomeration and surface chemistry models on soot formation and oxidation, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 32, p. 713–720, 2009.
- [38] B. Zhao, Z. Yang, M.V. Johnston, H. Wang, A.S. Wexler, Michael Balthasar, and M. Kraft: Measurement and numerical simulation of soot particle size distribution functions in a laminar premixed ethylene oxygen- argon flame, *Combustion and Flame*, Vol. 133, p. 173–188, 2003.
- [39] M.M. Maricq, S. J. Harris, and J.J. Szente: Soot size distributions in rich premixed ethylene flames, *Combustion and Flame*, Vol. 132, p. 328–342, 2003.
- [40] S.L. Manzello, D.B. Lenhert, A. Yozgatligil, M.T. Donovan, G.W. Mulholland, M.R. Zachariah, and Wing Tsang: Soot particle size distributions in a well-stirred reactor/plug flow reactor, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 31, p. 675–683, 2007.



Παραρτήματα

Παράρτημα Α

Τα σχετικά και τα απόλυτα σφάλματα της μάζας του οξυγόνου, του μεθανίου καθώς και του μίγματος που υπολογίστηκαν από τις χημικές ενώσεις του καυσαερίου επί υγρού. Τα παρακάτω υπολογισθέντα βασίστηκαν στην ακρίβεια του Gas Analyzer.

1st exp.								
N [kW]	λ	δ_{xi}	$\frac{\delta_{m_{O_2,pr}}}{m_{O_2,pr}}$	$\delta_{m_{O_2,pr}}$	$\delta_{m_{CH_4,pr}}$	$\frac{\delta_{m_{CH_4,pr}}}{m_{CH_4,pr}}$	$\delta_{m_{mix,pr}}$	$\frac{\delta_{m_{mix,pr}}}{m_{mix,pr}}$
1,5	0,4	±1,00%	±11,94%	±5,16196E-06	±5,50963E-06	±17,51%	±7,54996E-06	±3,18%
1,5	0,42	±1,00%	±11,86%	±5,3828E-06	±5,59796E-06	±17,78%	±7,76606E-06	±3,14%
1,5	0,45	±1,00%	±11,80%	±5,73948E-06	±5,85397E-06	±18,05%	±8,19821E-06	±3,11%
1,5	0,5	±1,00%	±11,69%	±6,31784E-06	±6,20047E-06	±18,63%	±8,85217E-06	±3,05%
1,5	0,52	±1,00%	±11,61%	±6,52468E-06	±6,33301E-06	±18,81%	±9,09277E-06	±3,02%
2	0,4	±1,00%	±11,89%	±6,85235E-06	±7,70671E-06	±17,14%	±1,03125E-05	±3,23%
2	0,45	±1,00%	±11,78%	±7,63928E-06	±7,85631E-06	±17,95%	±1,09581E-05	±3,11%
2	0,5	±1,00%	±11,53%	±8,30605E-06	±8,27223E-06	±18,42%	±1,17226E-05	±3,02%
2nd exp.								
1	0,6	±1,00%	±10,76%	±4,65032E-06	±4,31989E-06	±19,62%	±6,3472E-06	±2,79%
1,5	0,5	±1,00%	±11,47%	±6,19507E-06	±6,07694E-06	±18,60%	±8,67802E-06	±2,99%
1,5	0,52	±1,00%	±11,38%	±6,39322E-06	±6,18951E-06	±18,81%	±8,8985E-06	±2,96%
1,5	0,5	±1,00%	±11,40%	±6,15715E-06	±5,74173E-06	±19,43%	±8,41891E-06	±2,94%
1,5	0,46	±1,00%	±11,72%	±5,82702E-06	±5,84445E-06	±18,23%	±8,25299E-06	±3,07%
1,5	0,42	±1,00%	±11,79%	±5,35125E-06	±5,58257E-06	±17,70%	±7,73311E-06	±3,12%
1,5	0,42	±1,00%	±11,60%	±5,26442E-06	±5,61531E-06	±17,48%	±7,69713E-06	±3,10%
1,5	0,42	±1,00%	±11,54%	±5,23566E-06	±5,58242E-06	±17,47%	±7,65347E-06	±3,09%
1,5	0,42	±1,00%	±11,50%	±5,21837E-06	±5,56386E-06	±17,48%	±7,6281E-06	±3,08%
1,5	0,42	±1,00%	±11,45%	±5,19636E-06	±5,52183E-06	±17,49%	±7,5824E-06	±3,06%
1,5	0,4	±1,00%	±11,25%	±4,86001E-06	±4,86977E-06	±18,25%	±6,88E-06	±2,96%
1,5	0,5	±1,00%	±11,30%	±6,10435E-06	±6,08713E-06	±18,31%	±8,62069E-06	±2,97%
1,5	0,5							
1,5	0,6	±1,00%	±11,32%	±7,33924E-06	±7,10578E-06	±19,03%	±1,02155E-05	±2,95%
1,5	0,6	±1,00%	±11,33%	±7,34581E-06	±7,01756E-06	±19,15%	±1,01591E-05	±2,94%

**Παράρτημα Β**

Οι μάζα του μεθανίου και του οξυγόνου οι οποίες υπολογίστηκαν από της χημικές ενώσεις του καυσαερίου επί υγρού καθώς και η απόκλιση της μάζας σε σχέση με την εισερχόμενη. Σκοπός των παρακάτω υπολογισμών είναι ο έλεγχος της διατήρησης της μάζας. Σε συνδυασμό με την τελευταία στήλη του παραρτήματος Α αποδεικνύεται η διατήρηση της μάζας.

1st exp.									
N [kW]	λ	m _{N2} [kg]	m _{ch4,pr} [kg]	m _{ch4 f.c} [kg]	m _{o2,pr} [kg]	m _{o2,f.c} [kg]	m _{mix,pr} [kg]	m _{mix f.c} [kg]	Dm
1,5	0,4	0,00016258	3,1472E-05	2,997E-05	4,322E-05	4,322E-05	0,00023727	0,00023577	-0,64%
1,5	0,42	0,00017071	3,1485E-05	2,997E-05	4,538E-05	4,538E-05	0,00024757	0,00024606	-0,62%
1,5	0,45	0,0001829	3,2425E-05	2,997E-05	4,862E-05	4,862E-05	0,00026395	0,00026149	-0,94%
1,5	0,5	0,00020323	3,3287E-05	2,997E-05	5,402E-05	5,402E-05	0,00029053	0,00028722	-1,15%
1,5	0,52	0,00021135	3,3663E-05	2,997E-05	5,618E-05	5,618E-05	0,0003012	0,00029751	-1,24%
2	0,4	0,00021677	4,4955E-05	3,996E-05	5,762E-05	5,762E-05	0,00031935	0,00031436	-1,59%
2	0,45	0,00024387	4,3772E-05	3,996E-05	6,483E-05	6,483E-05	0,00035247	0,00034866	-1,09%
2	0,5	0,00027097	4,4907E-05	3,996E-05	7,203E-05	7,203E-05	0,0003879	0,00038296	-1,29%
2nd exp.									
1	0,6	0,00016258	2,2014E-05	1,998E-05	4,322E-05	4,322E-05	0,00022781	0,00022578	-0,90%
1,5	0,5	0,00020323	3,2669E-05	2,997E-05	5,402E-05	5,402E-05	0,00028992	0,00028722	-0,94%
1,5	0,52	0,00021135	3,2905E-05	2,997E-05	5,618E-05	5,618E-05	0,00030044	0,00029751	-0,99%
1,5	0,5	0,00020323	2,9555E-05	2,997E-05	5,402E-05	5,402E-05	0,0002868	0,00028722	0,14%
1,5	0,46	0,00018697	3,2066E-05	2,997E-05	4,97E-05	4,97E-05	0,00026873	0,00026664	-0,79%
1,5	0,42	0,00017071	3,1541E-05	2,997E-05	4,538E-05	4,538E-05	0,00024763	0,00024606	-0,64%
1,5	0,42	0,00017071	3,2128E-05	2,997E-05	4,538E-05	4,538E-05	0,00024822	0,00024606	-0,88%
1,5	0,42	0,00017071	3,196E-05	2,997E-05	4,538E-05	4,538E-05	0,00024805	0,00024606	-0,81%
1,5	0,42	0,00017071	3,1837E-05	2,997E-05	4,538E-05	4,538E-05	0,00024792	0,00024606	-0,76%
1,5	0,42	0,00017071	3,1565E-05	2,997E-05	4,538E-05	4,538E-05	0,00024765	0,00024606	-0,65%
1,5	0,4	0,00016258	2,6683E-05	2,997E-05	4,322E-05	4,322E-05	0,00023248	0,00023577	1,39%
1,5	0,5	0,00020323	3,3252E-05	2,997E-05	5,402E-05	5,402E-05	0,0002905	0,00028722	-1,14%
1,5	0,5								
1,5	0,6	0,00024387	3,7338E-05	2,997E-05	6,483E-05	6,483E-05	0,00034604	0,00033867	-2,18%
1,5	0,6	0,00024387	3,664E-05	2,997E-05	6,483E-05	6,483E-05	0,00034534	0,00033867	-1,97%



TROE/	0.6800	78.00	1995.00	5590.00	/			
H2/2.00/	H2O/6.00/	CH4/2.00/	CO/1.50/	CO2/2.00/	C2H6/3.00/	AR/0.70/		
H+CH3 (+M) <=> CH4 (+M)							1.270E+16	-0.630 383.00
LOW /	2.477E+33	-4.760	2440.00/					
TROE/	0.7830	74.00	2941.00	6964.00	/			
H2/2.00/	H2O/6.00/	CH4/2.00/	CO/1.50/	CO2/2.00/	C2H6/3.00/	AR/0.70/		
H+CH4 <=> CH3+H2							6.600E+08	1.620 10840.00
H+HCO (+M) <=> CH2O (+M)							1.090E+12	0.480 -260.00
LOW /	1.350E+24	-2.570	1425.00/					
TROE/	0.7824	271.00	2755.00	6570.00	/			
H2/2.00/	H2O/6.00/	CH4/2.00/	CO/1.50/	CO2/2.00/	C2H6/3.00/	AR/0.70/		
H+HCO <=> H2+CO							7.340E+13	0.000 0.00
H+CH2O (+M) <=> CH3O (+M)							5.400E+11	0.454 2600.00
LOW /	2.200E+30	-4.800	5560.00/					
TROE/	0.7580	94.00	1555.00	4200.00	/			
H2/2.00/	H2O/6.00/	CH4/2.00/	CO/1.50/	CO2/2.00/	C2H6/3.00/			
H+CH2O <=> HCO+H2							2.300E+10	1.050 3275.00
H+CH3O <=> OH+CH3							3.200E+13	0.000 0.00
H+C2H4 (+M) <=> C2H5 (+M)							1.080E+12	0.454 1820.00
LOW /	1.200E+42	-7.620	6970.00/					
TROE/	0.9753	210.00	984.00	4374.00	/			
H2/2.00/	H2O/6.00/	CH4/2.00/	CO/1.50/	CO2/2.00/	C2H6/3.00/	AR/0.70/		
H+C2H5 (+M) <=> C2H6 (+M)							5.210E+17	-0.990 1580.00
LOW /	1.990E+41	-7.080	6685.00/					
TROE/	0.8422	125.00	2219.00	6882.00	/			
H2/2.00/	H2O/6.00/	CH4/2.00/	CO/1.50/	CO2/2.00/	C2H6/3.00/	AR/0.70/		
H+C2H6 <=> C2H5+H2							1.150E+08	1.900 7530.00
H2+CO (+M) <=> CH2O (+M)							4.300E+07	1.500 79600.00
LOW /	5.070E+27	-3.420	84350.00/					
TROE/	0.9320	197.00	1540.00	10300.00	/			
H2/2.00/	H2O/6.00/	CH4/2.00/	CO/1.50/	CO2/2.00/	C2H6/3.00/	AR/0.70/		
OH+H2 <=> H+H2O							2.160E+08	1.510 3430.00
2OH <=> O+H2O							3.570E+04	2.400 -2110.00
OH+HO2 <=> O2+H2O							2.900E+13	0.000 -500.00
OH+CH2 <=> H+CH2O							2.000E+13	0.000 0.00
OH+CH2 (S) <=> H+CH2O							3.000E+13	0.000 0.00
OH+CH3 <=> CH2+H2O							5.600E+07	1.600 5420.00
OH+CH3 <=> CH2 (S)+H2O							2.501E+13	0.000 0.00
OH+CH4 <=> CH3+H2O							1.000E+08	1.600 3120.00
OH+CO <=> H+CO2							4.760E+07	1.228 70.00
OH+HCO <=> H2O+CO							5.000E+13	0.000 0.00
OH+CH2O <=> HCO+H2O							3.430E+09	1.180 -447.00
OH+C2H6 <=> C2H5+H2O							3.540E+06	2.120 870.00
HO2+CH2 <=> OH+CH2O							2.000E+13	0.000 0.00
HO2+CH3 <=> O2+CH4							1.000E+12	0.000 0.00
HO2+CH3 <=> OH+CH3O							2.000E+13	0.000 0.00
HO2+CO <=> OH+CO2							1.500E+14	0.000 23600.00
CH2+O2 <=> OH+HCO							1.320E+13	0.000 1500.00
CH2+H2 <=> H+CH3							5.000E+05	2.000 7230.00
CH2+CH3 <=> H+C2H4							4.000E+13	0.000 0.00
CH2+CH4 <=> 2CH3							2.460E+06	2.000 8270.00
CH2 (S)+N2 <=> CH2+N2							1.500E+13	0.000 600.00
CH2 (S)+AR <=> CH2+AR							9.000E+12	0.000 600.00
CH2 (S)+O2 <=> H+OH+CO							2.800E+13	0.000 0.00
CH2 (S)+O2 <=> CO+H2O							1.200E+13	0.000 0.00
CH2 (S)+H2 <=> CH3+H							7.000E+13	0.000 0.00
CH2 (S)+H2O <=> CH2+H2O							3.000E+13	0.000 0.00
CH2 (S)+CH3 <=> H+C2H4							1.200E+13	0.000 -570.00
CH2 (S)+CH4 <=> 2CH3							1.600E+13	0.000 -570.00
CH2 (S)+CO <=> CH2+CO							9.000E+12	0.000 0.00



Πειραματική και αριθμητική διερεύνηση πρότυπου αναμορφωτή

```
CH2 (S) +CO2<=>CH2+CO2          7.000E+12    0.000    0.00
CH2 (S) +CO2<=>CO+CH2O          1.400E+13    0.000    0.00
CH3+O2<=>O+CH3O                2.675E+13    0.000   28800.00
CH3+O2<=>OH+CH2O                3.600E+10    0.000    8940.00
2CH3 (+M) <=>C2H6 (+M)          2.120E+16   -0.970    620.00
    LOW / 1.770E+50   -9.670   6220.00/
    TROE/ 0.5325  151.00  1038.00  4970.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/0.70/
2CH3<=>H+C2H5                    4.990E+12    0.100   10600.00
CH3+HCO<=>CH4+CO                 2.648E+13    0.000    0.00
CH3+CH2O<=>HCO+CH4               3.320E+03    2.810    5860.00
CH3+C2H6<=>C2H5+CH4              6.140E+06    1.740   10450.00
HCO+H2O<=>H+CO+H2O              2.244E+18   -1.000   17000.00
HCO+M<=>H+CO+M                  1.870E+17   -1.000   17000.00
H2/2.00/ H2O/0.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/
HCO+O2<=>HO2+CO                  7.600E+12    0.000    400.00
CH3O+O2<=>HO2+CH2O              4.280E-13    7.600   -3530.00
C2H5+O2<=>HO2+C2H4              8.400E+11    0.000    3875.00
END
```




Πειραματική και αριθμητική διερεύνηση πρότυπου αναμορφωτή

