



مدل سازی آثار افزودن دوده و محصولات احتراق ناقص متان بر سینتیک شیمیایی احتراق متان و تولید آلاینده‌ها

علی سعیدی^{*}، رضا جلالی مهرآباد

مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، بیرجند، ایران

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۸ اسفند ۱۳۹۵
بازنگری: ۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۶
پذیرش: ۳۱ اردیبهشت ۱۳۹۶
ارائه آنلاین: ۱۷ خرداد ۱۳۹۶

کلمات کلیدی:

گاز طبیعی
دوده
سینتیک شیمیایی
احتراق

چکیده: تحقیقات پیشین نشان‌دهنده نقش بارز افزودن دوده در بهبود تابش شعله سوخت گاز طبیعی است؛ اما اثر این افزودنی بر تولید آلاینده‌ها و همچنین روند واکنش احتراق متان کمتر مورد توجه بوده است. پژوهش حاضر با استفاده از مکانیزم GRI3.0 و در شرایط صفر بعدی توسط کدهای کانترتا به بررسی سینتیکی اثر افزودن دوده با فرض حالت گازی بر واکنش‌های زنجیره‌ای احتراق متان و کسر مولی آلاینده‌ها و گونه‌های میانی احتراق متان می‌پردازد. همچنین افزودن محصولات احتراق ناقص متان به‌عنوان راهکاری برای کنترل آلاینده‌ها مورد ارزیابی سینتیکی قرار گرفته است. نتایج دقت قابل قبول استفاده از مدل صفر بعدی و مکانیزم GRI3.0 با فرض رفتاری گازی برای ذرات دوده برای ذرات با قطر کمتر از ۲۵ میکرون را نشان می‌دهد. تحلیل سینتیکی حاکی است افزودن دوده با فرض حالت گازی با افزایش نرخ تولید رادیکال‌های فعال در احتراق موجب تولید بیشتر آلاینده CO شده و با افزایش نسبی دما موجب رشد کسر مولی آلاینده NO خواهد شد. از طرفی افزودن محصولات احتراق ناقص باعث کاهش تولید آلاینده CO شده و دمای احتراق را نیز می‌کاهد. بر این اساس می‌توان به‌منظور افزایش تابش شعله و همچنین کنترل آلاینده‌ها ترکیبی از افزودنی کربن و محصولات احتراق ناقص را به احتراق متان اضافه نمود.

۱- مقدمه

گاز طبیعی به‌عنوان سوختی پاک که در مقایسه با سایر سوخت‌های فسیلی ۵۰ درصد کمتر تولید آلاینده دارد [۱]، حدود ۲۵ درصد تأمین انرژی در جهان را به خود اختصاص داده است [۲]. علی‌رغم گسترش روزافزون استفاده از این سوخت، به دلیل تابش پایین شعله آبی‌رنگ آن بازده انتقال حرارت از شعله دستگاه‌های احتراقی با سوخت گاز طبیعی در مقایسه با سایر سوخت‌های فسیلی افت متناهی را متحمل شده است [۳]. از این‌رو در اکثر صنایع، برای پوشش این افت بازده، از مشعل‌های با ظرفیت بالاتر استفاده نموده و برای رسیدن به شرایط مطلوب مصرف سوخت خود را بالا برده‌اند. انتقال حرارت تابشی در شعله سهم عمده‌ای را به خود اختصاص داده به‌طوری‌که در ناحیه تابشی شعله بیش از ۹۵ درصد کل انتقال حرارت از طریق تشعشع انجام می‌شود [۴]. تابش از شعله به‌طور کلی تحت تأثیر دو عامل اثرات متقابل تابش و آشفستگی^۱ و تابش ناشی از گونه‌های شرکت‌کننده در واکنش است [۵]. اثرات متقابل تابش و آشفستگی از وجود مؤلفه مشترک چگالی در معادلات حاکم هر دو پدیده نشأت گرفته و تأثیرپذیری متقابل تغییرات تابش و آشفستگی جریان را به همراه دارد [۶].

سنتو و همکاران [۵] با بررسی آزمایشگاهی و عددی دو عامل مذکور به این نتیجه رسیدند که نقش پدیده تی.آر.آی. در مقایسه با تابش ناشی از

گونه‌های شرکت‌کننده در واکنش احتراق قابل‌اغماض است. همچنین پس از بررسی عوامل مختلف بر تابش شعله و مشخص شدن سهم بالای تابش ذرات شرکت‌کننده در واکنش، به بررسی اثر دوده بر انتقال حرارت تابشی شعله متان پرداختند [۷]. نتایج تحقیقات نشان داد که با افزایش غلظت دوده، سهم تابش دوده از تابش کل از ۸ درصد به ۳۰ درصد افزایش می‌یابد و به‌عنوان مؤثرترین گونه جهت بهبود تابش شعله شناخته می‌شود.

در این راستا پور حسینی [۸] و همکاران اثر تزریق ذرات پودر زغال‌سنگ آنتراسیت (که بیش از ۹۵ درصد آن از کربن تشکیل شده است) را به شعله گاز طبیعی، بر ساختار شعله و انتقال حرارت تابشی از آن مورد بررسی قرار دادند. نتایج آن‌ها نشان داد که تزریق ذرات پودر زغال‌سنگ آنتراسیت به داخل شعله گاز طبیعی، ضمن افزایش سطح واکنشی شعله و بهبود درخشندگی آن، با بهبود ضریب صدور تابش شعله، انتقال حرارت تابشی آن را ۴۳ درصد افزایش می‌دهد. راکول و رانگوالا [۹] به‌صورت آزمایشگاهی و توسط فناوری تحلیلگر شعله هیبرید^۲ به بررسی اثر افزودن ذرات پودر زغال‌سنگ به شعله پیش‌آمیخته متان پرداختند. این تحقیق نشان می‌دهد در نسبت هم‌ارزی کوچک‌تر از ۱، افزودن ذرات پودر زغال‌سنگ با افزایش سطح واکنشی احتراق موجب افزایش دمای واکنش شده و شعله‌ای درخشان را ایجاد خواهد کرد. در کنار تحقیقات آزمایشگاهی، مدل‌سازی عددی احتراق گاز طبیعی در کنار افزودن ذرات کربن، پدیده‌ای است که در تحقیقات مختلف مورد بررسی

1 Turbulence-Radiation Interaction (TRI)

نویسنده عهده‌دار مکاتبات: ali.saeedi@birjand.ac.ir

2 Hybrid Flame Analyzer (HFA)

می‌باشد. به همین دلیل در دیدگاه جدید با اعمال فضای صفر بعدی، بررسی روند تغییرات مکانیزم واکنش‌های زنجیره‌ای احتراق مدنظر قرار می‌گیرد؛ با استفاده از این مدل قابلیت اعمال سینتیک کامل واکنش در محفظه احتراق و بررسی مشخصه‌های مختلف احتراقی فراهم شده و همچنین افزایش سرعت و دقت در محاسبات برای مقادیر گونه‌ها و پیش‌بینی عملکرد احتراق مشاهده می‌شود [۱۶]. لذا در تحقیق حاضر مدل‌سازی احتراق متان با افزودن ذرات دوده برای ذرات ریز کربن (ذرات با قطر کمتر از ۲۵ میکرون) با فرض رفتار گازی برای این ذرات انجام خواهد شد. تغییرات چگالی ذرات کربن با استفاده از قانون گاز کامل مدل خواهد شد و از مکانیزم GRI3.0 به‌عنوان مرجع کامل واکنش‌های احتراق استفاده می‌شود. در این بین تحقیقات پیشین و آزمایش‌های صورت گرفته نشان‌دهنده نقش بارز و مهم دوده در بهبود درخشندگی و تابش شعله است؛ نکته قابل‌تأملی که در این میان کمتر به آن اشاره شده تأثیر افزودن دوده بر واکنش‌های زنجیره‌ای احتراق متان و گونه‌های میانی این واکنش‌ها و افزایش تولید آلاینده‌های مخرب اکسیدهای نیتروژن در اثر افزایش دما و مونواکسید کربن است. بر این اساس پژوهش حاضر به بررسی تغییر کمیت‌های سینتیکی واکنش‌های زنجیره‌ای احتراق متان با افزودن دوده با فرض حالت گازی در مواد اولیه خواهد پرداخت. همچنین به‌منظور امکان‌سنجی اصلاح فرآیند احتراق متان با افزودن دوده در جهت کاهش انتشار آلاینده‌های NOx و CO، افزودن محصولات احتراق ناقص متان به واکنش احتراق گاز طبیعی به‌عنوان راهکاری برای کنترل آلاینده‌ها مورد ارزیابی سینتیکی قرار خواهد گرفت.

۲- مبانی و روش حل

۲-۱- مساله

در این تحقیق گاز طبیعی به‌عنوان سوخت اصلی و دوده و محصولات احتراق ناقص متان به‌عنوان افزودنی‌ها مورد بررسی و تحلیل سینتیکی واکنش‌ها قرار خواهند گرفت. در مدل‌سازی احتراق متان، ترکیب سوخت متان و هوا $O_2 + 3/7143N_2 + 0/04762Ar$ به‌صورت یک گاز ایدئال فرض شده و رفتار ترمودینامیکی سیال توسط معادله گاز کامل شبیه‌سازی می‌شود. اما در مدل‌سازی افزودن کربن، دو دیدگاه متفاوت وجود دارد. در حالت اول همان‌طور که اشاره شد می‌توان ذرات کربن را آن‌قدر ریز در نظر گرفت که رفتار یک گاز را داشته باشند و همانند گاز متان از معادله گاز کامل برای شبیه‌سازی ارتباط بین خواص ترمودینامیکی آن استفاده نمود. اما در دیدگاهی دیگر، برای بررسی اثر افزودن ذرات درشت‌تر کربن، می‌توان آن را به‌صورت ذراتی جامد در نظر گرفت که به همراه سوخت و هوا وارد محفظه شده و یک‌فاز جامد-گاز را ایجاد می‌کنند که در آن واکنش بین ذرات جامد کربن و گازهای حاضر در محفظه احتراق رخ خواهد داد. این دو حالت را می‌توان به‌عنوان حالت کمینه و بیشینه اندازه ذرات کربن در نوع رفتار آن‌ها در احتراق مدنظر قرارداد که با توجه به تحقیقات زی و همکاران [۱۰] برای ذرات دوده با قطر بین $0 \mu m$ الی $25 \mu m$ فرض رفتار گازی (حالت اول) و

قرار گرفته است. زی و همکاران [۱۰] به بررسی اثر اندازه ذرات افزودنی پودر زغال‌سنگ به شعله پیش‌آمیخته متان-هوا در نسبت‌های هم‌ارزی کمتر از ۱ پرداخته‌اند. نتایج نشان دهنده نقش مهم اندازه ذرات افزودنی کربن بر روند احتراق بوده به‌صورتی که افزودن ذرات با قطر کوچک‌تر از ۲۵ میکرون موجب افزایش دمای احتراق شده و برای ذرات با قطر بزرگ‌تر از ۹۵ میکرون کاهش نسبی دما مشاهده می‌شود.

بردلی و همکاران در تحقیقات خود [۱۱ و ۱۲] به صورت عددی و آزمایشگاهی به بررسی ترکیب احتراق متان و گرافیت در شرایط فشار پایین و تأثیر آن بر مشخصه‌های پایداری شعله پرداخته‌اند. آزمایش‌ها با افزودن ذرات با قطر حدود ۴ میکرون انجام شده است. مدل‌سازی عددی در شرایط یک‌بعدی، با فرض چگالی ثابت برای ذرات کربن و حل معادلات بقای جرم، انرژی و مومنتوم و همچنین استفاده از مکانیزم واکنش دیکسون^۱ [۱۳] انجام شده است. نتایج نشان می‌دهد حل یک‌بعدی احتراق در شرایط مذکور از دقت نسبی برخوردار بوده اما فرض چگالی ثابت برای ذرات ریز کربن موجب شده تا مقادیر خطا در محاسبه کسر مولی گونه‌های احتراق و سرعت شعله آرام مشهود باشد. در این راستا رالف [۱۴] در یک تحقیق عددی با بررسی تأثیر ابعاد ذرات بر رفتار احتراقی آنان نشان داد با بزرگ شدن ابعاد ذرات، حداقل انرژی لازم برای اشتعال‌پذیری آن‌ها به‌صورت خطی افزایش یافته و تغییرات چگالی آن‌ها در طی زمان احتراق به صورت خطی کاهش می‌یابد. لذا در مدل‌سازی احتراق ذرات بزرگ‌تر می‌توان چگالی ذرات را ثابت فرض نمود اما برای ذرات ریز کربن تغییرات چگالی بیش از هرچیز بر روند پیشروی واکنش تأثیرگذار بوده و تغییرات آن باید مورد بررسی قرار گیرد.

با توجه به نقش مهم مکانیزم کامل واکنش در شبیه‌سازی فرایند احتراق، اگولفولپوس [۱۵] در یک کار عددی و با استفاده از مکانیزم GRI2.1 و حل معادلات ساده‌شده مومنتوم و انرژی به بررسی اثر هم‌سوزی متان و گرافیت در حالت شعله ایستا^۲ پرداخته‌اند. مقایسه نتایج آزمایشگاهی و عددی این تحقیق حاکی از آن است، در فاز گاز، مکانیزم GRI با توجه به دارا بودن گونه C و در نظر گرفتن واکنش‌های میانی مربوط به آن، مکانیزم مناسبی جهت بررسی برانکشن سوخت متان و دوده به‌حساب می‌آید.

هم‌اکنون پدیده‌های احتراقی با انجام تحلیل‌های دینامیک سیالات محاسباتی و با استفاده از نرم‌افزارهای شبیه‌سازی مانند فلوئنت^۳، سی.اف.ایکس^۴ و این‌فوم^۵ به‌صورت دقیق قابل‌بررسی می‌باشند، اما برای تخمین و محاسبه مقادیر گونه‌های حاصل از احتراق مانند آلاینده‌ها و گونه‌های سمی UCH، H_2S ، SO_x ، NO_x و CO مدل کاملی از سینتیک واکنش رخ داده در احتراق موردنظر نیاز است. تحلیل دینامیک سیالات محاسباتی به دلیل پیچیده بودن معادلات و وجود محدودیت‌های محاسباتی بسیار زمان‌بر

- 1 Dixon
- 2 Stagnation flame
- 3 Fluent
- 4 CFX
- 5 OpenFOAM

در شرایط فشار ۱ اتمسفر و دماهای بالاتر از ۱۵۰۰°C شرایط تعادلی در واکنش‌های زنجیره‌ای این مکانیزم حاکم است؛ لذا با فرض دمای عملکردی بالای ۱۵۰۰°C در احتراق متان، واکنش‌های زنجیره‌ای در حالت تعادلی بوده و معادلات شرایط تعادلی برای حل مقادیر مجهول اتخاذ خواهد شد. نقطه تعادل یک فرآیند زمانی است که آنتروپی ماکزیمم و یا انرژی آزاد گیبس به کمینه مقدار خود برسد [۱۸]، لذا از این اصل برای محاسبه غلظت گونه‌های تشکیل‌شده در واکنش‌های شیمیایی در شرایط تعادلی استفاده می‌گردد. روش‌های عددی مختلفی جهت کمینه‌سازی معادله تابع گیبس و یافتن ترکیب تعادلی نهایی واکنش شیمیایی در تحقیقات مختلف استفاده شده است که با توجه به سرعت و دقت عملکردی روش المان پتانسیل در تحقیق حاضر از این روش استفاده خواهد شد. این روش یکی از مدل‌های روش‌های غیر استوکیومتریک بوده که تابع:

$$\min \left(G(T, P, n) = \sum_{i=1}^N n_i \mu_i \right) \quad (1)$$

G : تابع انرژی آزاد گیبس
 T : دما (بر واحد کلوین)
 P : فشار (بر واحد پاسکال)
 n : مول

n_i : تعداد مول‌های گونه i

N : تعداد گونه‌ها در واکنش شیمیایی

را با اعمال معادله بقای گونه‌ها و با استفاده از روش ضرایب لاگرانژ حل می‌کند:

$$\zeta(n, \lambda) = \sum_{i=1}^N n_i \mu_i + \sum_{k=1}^M \lambda_k \left(b_k - \sum_{i=1}^N a_{ki} n_i \right) \quad (2)$$

برای ذرات با قطر بالاتر از ۹۵ μm فرض چگالی ثابت برای ذرات اعمال می‌شود.

در تحقیق حاضر دیدگاه اول مدنظر قرار گرفته و با فرض فاز گاز برای ذرات کربن از معادله گاز کامل برای مدل‌سازی رفتار ترمودینامیکی ذرات کربن در واکنش‌های احتراق استفاده می‌شود. به این منظور دوده (با فرض حالت گازی) و محصولات احتراق ناقص متان به‌صورت زیر به سوخت اولیه اضافه می‌گردند:

الف) مطابق شکل ۱ ابتدا از یک مول سوخت، α مول ($\alpha < 1$) گاز طبیعی با x مول هوا به نحوی واکنش می‌دهد که دوده بیشترین مقدار خود را در محصولات احتراق داشته باشد. سپس محصولات این واکنش ناقص با $(1-\alpha)$ مول باقیمانده متان و ۱۵ درصد هوای اضافی واکنش می‌دهند.

ب) مطابق شکل ۲ فرض می‌شود ابتدا β مول ($\beta < 1$) متان تجزیه حرارتی شده و کل محتوی سوخت به دوده تبدیل گردد سپس این مقدار دوده (کربن) به همراه $(1-\beta)$ مول متان باقیمانده با ۱۵ درصد هوای اضافه واکنش می‌دهند.

بازه تغییرات مقادیر α و β با بررسی عملکرد واکنش احتراق متان به ترتیب در بازه صفر تا ۰/۳ و صفر تا ۰/۰۹ مورد بررسی قرار خواهد گرفت. مقدار x (مول هوا در احتراق ناقص برای تولید حداکثر دوده) در قسمت نتایج محاسبه خواهد شد.

۲-۲- فرضیات و معادلات حاکم

مکانیزم احتراق مطابق شکل ۳ در یک راکتور کاملاً آمیخته^۲ و در فضای صفر بعدی مورد بررسی قرار خواهد گرفت. یونسی و همکاران [۱۷] با بررسی شرایط متفاوت دمایی و فشاری برای احتراق متان نشان دادند

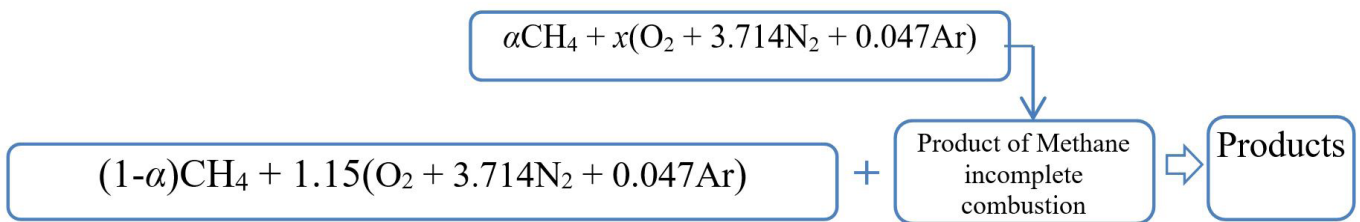


Fig. 1. The schematic of adding methane incomplete combustion products to methane-air combustion

شکل ۱: طرحواره افزودن محصولات احتراق ناقص

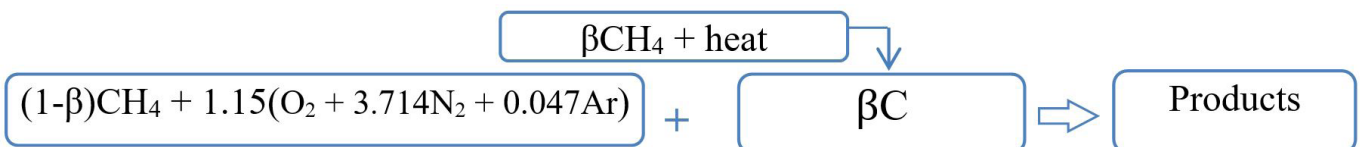


Fig. 2. The schematic of adding soot to methane-air combustion

شکل ۲: طرحواره افزودن دوده

- 1 Air: $\text{O}_2 + 3.7143\text{N}_2 + 0.04762\text{Ar}$
- 2 Perfectly-Stirred Reactor (PSR)

ضرایب نرخ مرتبط با آنها و خواص ترموشیمیایی ۵۳ گونه تولیدی است. در این مکانیزم شرایط با فرض حالت گازی ارائه شده است. واکنش‌های زنجیره‌ای این مکانیزم در محدوده دمای ۱۰۰۰ کلوین تا ۲۵۰۰ کلوین، فشار ۱ کیلو پاسکال تا ۱۰۰۰ کیلو پاسکال و نسبت هم‌ارزی ۱ تا ۵ به‌طور گسترده‌ای استفاده و اعتبارسنجی شده‌اند [۲۲]. طرحواره کلی روند پیشروی واکنش‌های زنجیره‌ای در مکانیزم GRI3.0 به‌صورت شکل ۳ بوده که برای احتراق متان در فشار ۱ اتمسفر، دمای ۲۱۰۰ کلوین و در نسبت هم‌ارزی ۱ ترسیم شده است [۲۳].

تمامی روابط مربوطه و حل دستگاه معادلات توسط کد کانتررا [۲۴] در محیط متلب و با روش نیوتن میرا انجام شده است. مجموعه کانتررا، به‌عنوان یک ابزار نرم‌افزاری با مدل برنامه‌نویسی شیء‌گرا در زمینه احتراق، سینتیک شیمیایی، فرایندهای ترمودینامیکی و انتقال جرم و حرارت در سال ۲۰۰۱ توسط

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial \zeta}{\partial n_i} \right) = \mu_i - \sum_{k=1}^M a_{ki} \lambda_k = 0 \\ \left(\frac{\partial \zeta}{\partial \lambda_k} \right) = b_k - \sum_{i=1}^N a_{ki} n_i = 0 \end{cases} \quad (3)$$

ζ : تابع ترکیبی

λ_k : ضریب گونه k در معادله واکنش

a_{ki} : تعداد عنصر k در فرمول شیمیایی گونه i

b_k : مقدار مول کلی عنصر در واکنش (عدد ثابت ورودی)

n_i : تعداد مول‌های گونه i

μ_i : پتانسیل شیمیایی گونه i

M : تعداد عناصر

N : تعداد گونه‌ها در واکنش شیمیایی

حل دستگاه معادله غیرخطی (۳) با استفاده از روش نیوتن برای تمامی واکنش‌های زنجیره‌ای، گونه‌ها و عناصر شرکت‌کننده در واکنش ترکیب تعادلی محصولات خروجی را به ازای هر نوع ترکیبی از هوا و سوخت ورودی مشخص خواهد نمود. ویرایش ابتدایی این مدل با نام استنجان [۱۹] در دانشگاه استنفورد ارائه شد و توسط اسمیت و ویلیامز [۲۰] توسعه داده شده است که در حال حاضر در برنامه‌های کد نویسی مختلف قابل استفاده است. اما مشخصه‌های بارز در بررسی سینتیک یک مکانیزم شیمیایی نرخ واکنش (q) و ثابت تعادلی (K_p) واکنش بوده که نوع پیشروی واکنش‌ها و تغییرات سینتیک مربوط به آنان را نمایان می‌سازد. در حالت کلی نرخ واکنش معیاری از اهمیت یک واکنش در بین واکنش‌های زنجیره‌ای مکانیزم نیز به شمار می‌آید. افزایش و یا کاهش این مؤلفه تأثیر قابل توجهی بر روند پیشروی احتراق و کسر مولی محصولات نهایی خواهد گذاشت. همچنین می‌توان بر اساس بزرگی مقادیر ثابت تعادلی شرایط تعادل گونه‌ها را در واکنش‌های رفت و برگشتی مشخص نمود. در یک واکنش تعادلی، مقدار $K_p > 1$ نشان‌دهنده اثر غالب کسر مولی محصولات بر واکنش‌دهنده‌ها و پیشبرد واکنش در جهت رفت بوده که بزرگی هر چه بیشتر این مقدار تشدیدکننده این اثر خواهد بود و واکنش را به سمت یک واکنش کامل سوق می‌دهد. در نقطه مقابل مقادیر $K_p < 1$ نشان‌دهنده پیشبرد واکنش در جهت برگشت است. مقدار واحد برای ثابت تعادل ($K_p = 1$) و حتی مقادیر نزدیک به واحد، تعادل نسبی بین جهت رفت و برگشت واکنش را نشان می‌دهد که در این شرایط تغییرات ثابت تعادل تأثیر قابل توجهی بر محصولات خروجی واکنش و کسر مولی نهایی گونه‌ها خواهد داشت [۲۱].

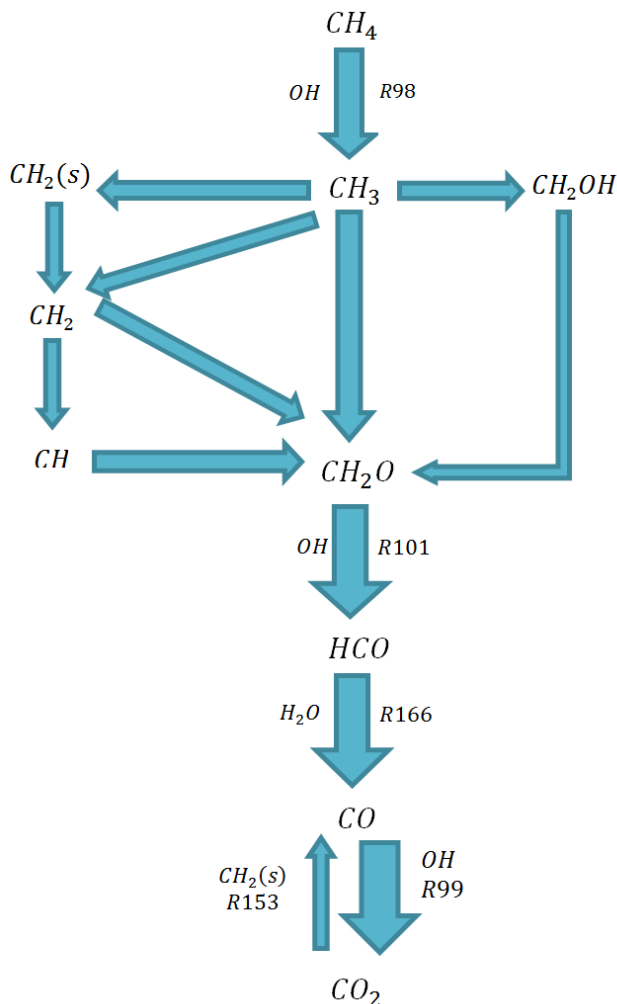


Fig. 3. The schematic of chain reactions progress in GRI3.0 mechanism
 شکل ۳: طرحواره کلی روند پیشروی واکنش‌های زنجیره‌ای در مکانیزم GRI3.0 [۱۸]

۲-۳- ابزار حل

اطلاعات مربوط به واکنش‌های زنجیره‌ای و خواص ترمودینامیکی گونه‌های حاضر در احتراق متان از نتایج تحقیقات مرکز مطالعات و تحقیقات گاز برگرفته شده است. آنها مکانیزم‌هایی را بسط و توسعه داده‌اند که آخرین ویرایش آن با عنوان GRI3.0 شامل ۳۲۵ واکنش شیمیایی و توصیف

۳- نتایج

۳-۱- اعتبارسنجی

مدل سازی تأثیر افزودن دوده با فرض حالت گازی و محصولات احتراق ناقص بر ثابت تعادلی و نرخ واکنش های معرفی شده با کمک کدهای کانترا انجام شد. اعتبارسنجی عملکرد کد حاضر در شبیه سازی احتراق متان توسط نتایج آزمایشگاهی لوک و تساتسارونیز [۲۵] برای تغییرات دمای آدیاباتیک شعله در نسبت هم‌ارزی های مختلف متان-هوا صورت گرفت و نتایج عددی و آزمایشگاهی این مقایسه در شکل ۴ قابل مشاهده است. لوک و تساتسارونیز با تغییر نسبت هم‌ارزی متان-هوا در محدوده ۰/۵ الی ۱/۴، تغییرات دمای آدیاباتیک شعله را گزارش کردند. در مدل سازی تحقیق حاضر در حالت احتراق طبیعی متان با تغییر محدوده نسبت هم‌ارزی مطابق مرجع موردنظر نمودار خط پر در شکل ۴ حاصل شد که در بیشترین حد دما نشان دهنده ۳ درصد خطا بین نتایج عددی و آزمایشگاهی است.

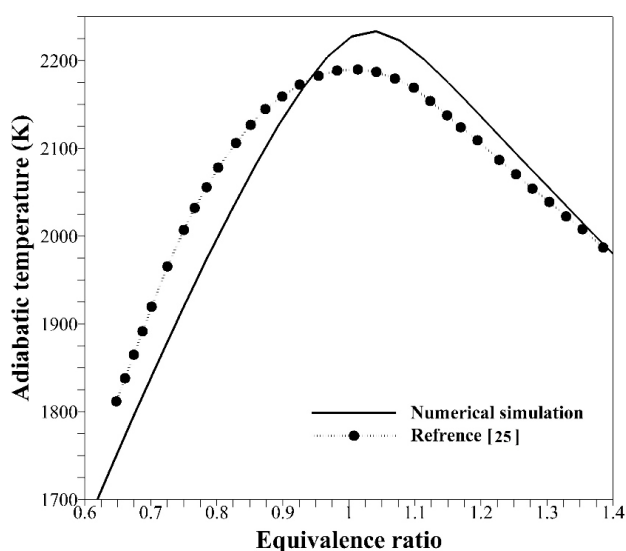


Fig. 4. The validation of results with experimental data ref. [25]

شکل ۴: اعتبارسنجی با نتایج آزمایشگاهی مرجع [۲۵]

همان طور که اشاره شد مدل سازی افزودن ذرات ریز کربن با فرض رفتار گازی برای این ذرات توسط معادله گاز کامل در شرایط صفر بعدی مدل شده و اثر حضور گونه C در واکنش های احتراقی توسط مکانیزم GRI3.0 مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه تحقیقات آزمایشگاهی محدود انجام شده در این زمینه اعتبارسنجی این مدل با مقایسه نتایج عددی اعتبارسنجی شده زی و همکاران [۱۰] صورت خواهد گرفت.

زی و همکاران [۱۰] به مدل سازی اثر افزودن ذرات دوده بر سوخت متان در حالت یک بعدی و با بررسی میزان تجزیه حرارتی ذرات دوده در محدوده دما بالای شعله و بررسی اثر آن بر دما و سرعت آرام شعله پرداخته اند. نرخ تجزیه ذرات دوده با ابعاد بین ۰ الی ۲۵ میکرون توسط مدل سشاردی و همکاران [۲۶] محاسبه شده و با فرض شرایط تعادلی و حل معادله انرژی و مومنتوم، مقادیر دما و ضخامت و سرعت آرام شعله محاسبه شده است.

پروفسور دیوید جی گودوین^۱ در موسسه فناوری کالیفرنیا (کالتک^۲) طراحی و ارائه شد. کانترا در حال حاضر برای برنامه های کاربردی از جمله احتراق، انفجار، تبدیل انرژی الکتروشیمیایی و ذخیره سازی، سلول های سوختی، باتری ها، راه حل های آبی الکترولیت، پلاسما و رسوب فیلم استفاده شده و با شبیه سازی دقیق این فرایندها قادر به محاسبه خواص ترمودینامیکی متفاوتی همچون دمای آدیاباتیک شعله، فشار، آنتالپی، آنتروپی، انرژی آزاد گیبس و دیگر پارامترهای سینتیکی و پارامترهای مربوط به فرایندهای انتقال جرم و حرارت است. در حال حاضر کانترا تحت نرم افزارهای پایتون^۳ و متلب و یا در برنامه های نوشته شده در C++ و فرترن ۹۰ قابل اجرا است.

با بررسی و مقایسه نرخ واکنش های زنجیره ای مکانیزم GRI3.0 در فرایند احتراق رسم شده در شکل ۳، می توان روند اصلی پیشروی واکنش را به شرح زیر در نظر گرفت [۱۸]. در ابتدا CH_4 طی واکنش ابتدایی ۹۸، و در حضور رادیکال OH به CH_3 تجزیه می شود. متیل^۴ تولیدی در چندین واکنش میانی و طی ترکیب با رادیکال های مختلف به گونه CH_2O تبدیل می شود. با توجه به گستره وسیع واکنش های میانی، انتخاب واکنش واحد در این مرحله امری مشکل است. CH_2O تولیدی در واکنش ۱۰۱ با رادیکال OH وارد واکنش شده و رادیکال مهم HCO را تولید می کند. فرمیل^۵ تولیدی مقدمه تولید مونواکسید کربن بوده که در حضور H_2O در واکنش ۱۶۶ به H و CO تجزیه می شود. مهم ترین مرحله احتراق متان واکنش ۹۹ است که از ترکیب OH و CO محصول نهایی دی اکسید کربن تولید و بخش عمده انرژی احتراق آزاد می گردد. در این مرحله امکان تجزیه دوباره دی اکسید کربن و تشکیل دوباره CO نیز وجود دارد. تحلیل سینتیکی احتراق در اثر افزودن دوده و محصولات احتراق ناقص با بررسی روند مذکور صورت می پذیرد. لازم به ذکر است روند حل با در نظر گرفتن تمامی ۳۲۵ واکنش مکانیزم GRI3.0 صورت گرفته است؛ اما تحلیل نتایج کسر مولی گونه های مدنظر بر اساس واکنش های انتخابی صورت خواهد گرفت. واکنش های مورد بررسی در جدول ۲ دسته بندی شده است. لازم به ذکر است شماره هر واکنش بر اساس شماره استاندارد آن در مکانیزم GRI3.0 بیان شده است.

جدول ۱: واکنش های اساسی زنجیره ای احتراق متان

Table 1. The most important reactions in methane-air combustion

شماره واکنش	معادله شیمیایی واکنش
(R 98)	$CH_4 + OH \leftrightarrow CH_3 + H_2O$
(R 101)	$CH_2O + OH \leftrightarrow HCO + H_2O$
(R 166)	$H_2O + HCO \leftrightarrow CO + H + H_2O$
(R 99)	$CO + OH \leftrightarrow CO_2 + H$

- 1 David G. Goodwin
- 2 California Institute of Technology
- 3 Python
- 4 Methyl (CH_3)
- 5 Formyl (HCO)

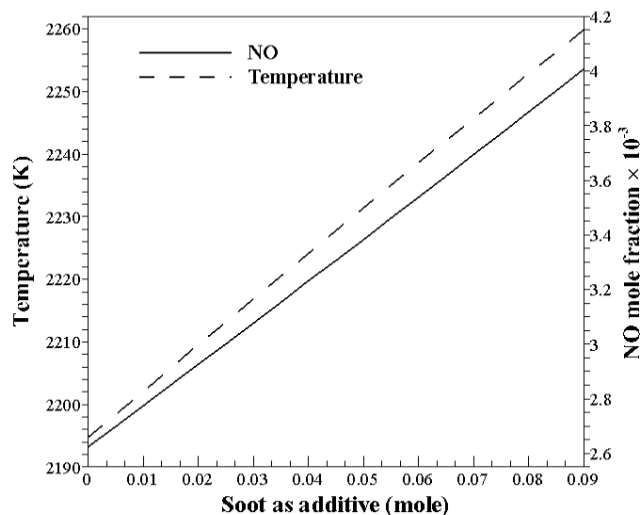


Fig. 6. The effect of adding soot in gaseous state on adiabatic flame temperature and NO mole fraction

شکل ۶: تأثیر افزودن دوده با فرض حالت گازی بر دمای آدیاباتیک و کسر مولی گونه NO

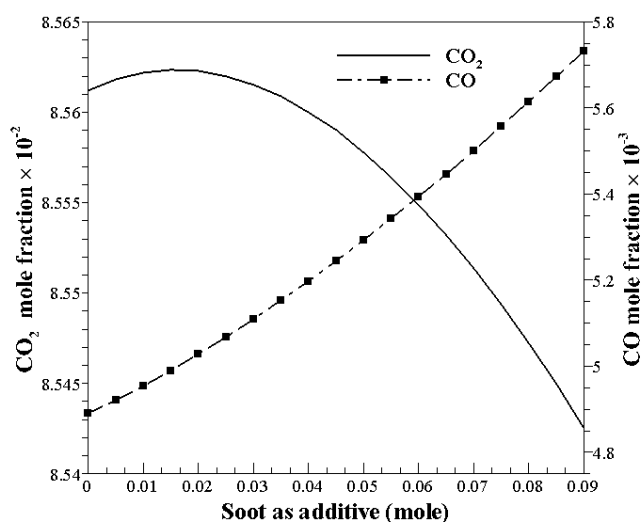


Fig. 7. The effect of adding soot in gaseous state on CO and CO₂ mole fractions

شکل ۷: تأثیر افزودن دوده با فرض حالت گازی بر کسر مولی گونه‌های CO₂ و CO

به واکنش ۹۹ رشد کسر مولی CO، در ابتدا موجب افزایش تولید CO₂ می‌شود اما در واکنش‌های گرمزا (واکنش‌های مرحله نهایی احتراق) پایداری محصولات در دماهای بالاتر کاهش یافته و موجب تجزیه دوباره آن‌ها و بازگشت واکنش به سمت تولید واکنش‌دهنده‌ها می‌گردد. ارتباط منفرد ثابت تعادل به دما نیز به همین امر مرتبط می‌شود [۲۷]. با افزودن مول بیشتر کربن، دمای واکنش نیز افزایش یافته و شرایط تجزیه دوباره دی‌اکسید کربن فراهم می‌شود و کسر مولی این محصول احتراق با افزودن کربن بیشتر، کاهش خواهد یافت. در ادامه با بررسی تأثیرات افزودن دوده با فرض حالت گازی بر واکنش‌های زنجیره‌ای احتراق متان، می‌توان علل این تغییرات را در

اعتبارسنجی نتایج این مدل در مقادیر سرعت آرام شعله با نتایج آزمایشگاهی نشان‌دهنده دقت قابل قبول کد عددی است. مقایسه نتایج اثر افزودن دوده بر تغییرات دمای آدیاباتیک شعله در سه نسبت هم ارزی مختلف بین نتایج زی و همکاران و کد حاضر در شکل ۵ نشان‌دهنده دقت قابل قبول فرض صفر بعدی و استفاده از معادله گاز کامل در این شرایط عملکردی است.

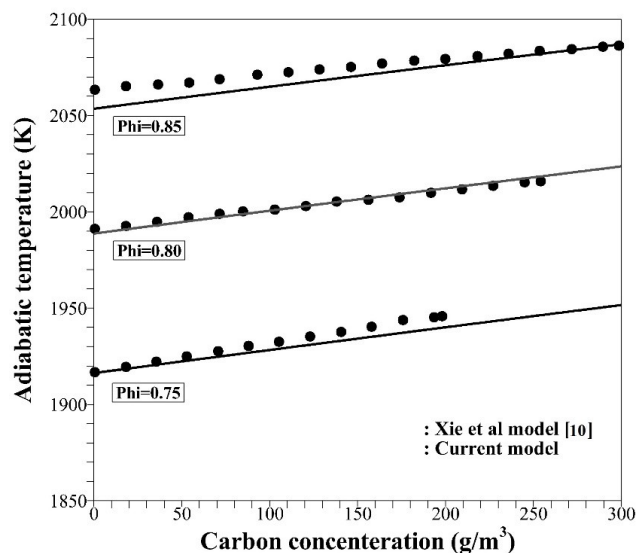


Fig. 5. The comparison of adiabatic flame temperature by adding soot between numerical results and ref. [10]

شکل ۵: اعتبار سنجی اثر افزودن دوده بر دمای آدیاباتیک شعله با نتایج مرجع [۱۰]

۳-۲- افزودن دوده با فرض حالت گازی

شکل ۶ تغییرات دما و کسر مولی آلاینده NO را در اثر افزودن دوده نشان می‌دهد. افزودن کربن (دوده با فرض حالت گازی) از صفر تا ۰/۰۹ مول با کاهش مول سوخت به همان میزان موجب افزایش دمای آدیاباتیک شعله از ۲۱۹۴ به ۲۲۵۹ کلوین خواهد شد. نتایج آزمایشگاهی پور حسینی و مقیمان [۸] بر اساس غلظت‌های متفاوت کربن در طول شعله بین ۴/۸۶ تا ۷/۶۱ درصد افزایش دما را نشان می‌دهد که نتایج حل عددی کد حاضر نیز افزایش ۴/۲۱ تا ۷/۲۴ درصدی دما را ثبت کرده است. این دو نتیجه در توافق باهم بوده و مرتبه افزایش دما را به یک اندازه نشان می‌دهند. به همراه این افزایش دما نتایج نشان‌دهنده افزایش ۵۳ درصدی کسر مولی NO در اثر تزریق ۰/۰۹ مول دوده است.

اثر افزودن کربن بر آلاینده CO و همچنین محصول نهایی CO₂ در شکل ۷ مورد بررسی قرار گرفته است. همان‌طور که نمودار نشان می‌دهد افزودن ۰/۰۹ مول دوده با فرض حالت گازی، افزایش ۱۷ درصدی کسر مولی CO را به همراه خواهد داشت. بررسی نتایج تغییرات کسر مولی دی‌اکسید کربن نشان می‌دهد که با افزودن صفر تا ۰/۰۱۵ مول کربن، تولید CO₂ افزایش یافته و برای مول‌های بیشتر کربن کاهش دی‌اکسید کربن نهایی را خواهیم داشت. در توصیف این پدیده با توجه

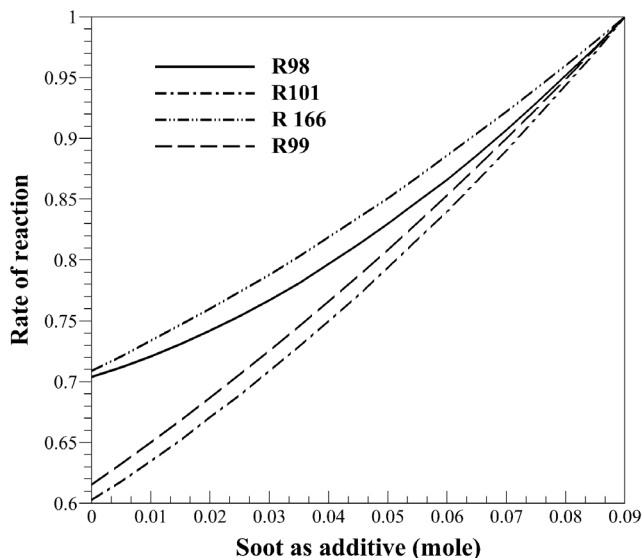


Fig. 9. The effect of adding soot in gaseous state on equilibrium constant and rate of reaction No. 166

شکل ۹: تأثیر افزودن دوده با فرض حالت گازی بر ثابت تعادلی و نرخ واکنش ۱۶۶

شاخه‌ای دارند [۱۹]، لذا این مرحله از احتراق متان به شدت تحریک خواهد شد.

بررسی تغییرات نرخ واکنش‌های ۱۶۶ و ۹۹ نیز نشان‌دهنده افزایش ۴۰ و ۵۳ درصدی این دو مؤلفه است. اما تغییرات کلی در این دو واکنش با بررسی تغییرات ثابت تعادلی آن‌ها مشخص خواهد شد. در شکل ۱۰ نمودار تغییرات ثابت تعادلی واکنش ۱۶۶ (تجزیه HCO به CO و H) و واکنش شماره ۹۹ با افزودن ۰ تا ۰/۰۹ مول کربن ترسیب‌شده است. بررسی ثابت تعادلی واکنش ۱۶۶ نشان می‌دهد افزایش دما در اثر افزودن دوده در کنار افزایش غلظت فرمیل (طبق شکل ۸) موجب تجزیه بیشتر این گونه می‌شود و با افزایش مقدار عددی K_p ، باعث گرایش تعادل به سمت محصولات و تولید بیشتر گونه‌های CO و H می‌گردد. افزایش هم‌زمان ثابت تعادل و نرخ واکنش به معنای پیشروی سریع‌تر و افزایش غلظت گونه‌ها در سمت راست واکنش تعادلی ۱۶۶ بوده که نرخ بالاتر تولید مونواکسید کربن و رادیکال هیدروژن را به همراه خواهد داشت.

مهم‌ترین واکنش در مکانیزم احتراق متان، واکنش شماره ۹۹ است که از ترکیب CO و رادیکال OH، محصول نهایی دی‌اکسید کربن تشکیل شده و سهم عمده‌ای از انرژی کلی واکنش را تأمین می‌کند [۲۳]. نکته قابل توجه مقدار عددی ثابت تعادل این واکنش است که به مقدار واحد نزدیک است؛ لذا این واکنش در شرایط تعادل بین جهت رفت و برگشت بوده، از این رو تغییرات جزئی در مقدار ثابت تعادل این واکنش تأثیر قابل توجهی بر گونه‌های نهایی خواهد داشت. نتایج در این زمینه نشان می‌دهد تزریق ۰/۰۹ مول دوده با فرض حالت گازی کنار تأثیر مثبتی که برتابش و درخشندگی شعله دارد در مهم‌ترین گام، موجب کاهش ۱۱ درصدی ثابت تعادل و افزایش ۵۳ درصدی نرخ واکنش ۹۹ می‌شود. این تغییرات مطابق شکل ۷ نه‌تنها روند تولید

نرخ واکنش و تغییرات ثابت تعادلی آن‌ها مشاهده نمود.

شکل ۸ اثر افزودن دوده با فرض حالت گازی را بر کسر مولی گونه‌های میانی CH_3 ، CH_2O و HCO نشان می‌دهد. افزودن دوده از ۰/۰۱ تا ۰/۰۹ مول با کاهش مول سوخت به همان میزان باعث افزایش ۳۸ درصدی کسر مولی CH_3 ، افزایش ۲۰ درصدی کسر مولی CH_2O و افزایش ۳ درصدی کسر مولی HCO می‌شود. لذا با توجه به مکانیزم شکل ۳ می‌توان نتیجه گرفت که افزودن دوده بر مسیر اصلی واکنش‌های زنجیره‌ای احتراق متان بسیار تأثیرگذار بوده و با افزایش فعالیت و کسر مولی رادیکال‌های OH، O و H موجب تولید بیشتر گونه‌های مهم متیل و فرمیل خواهد شد.

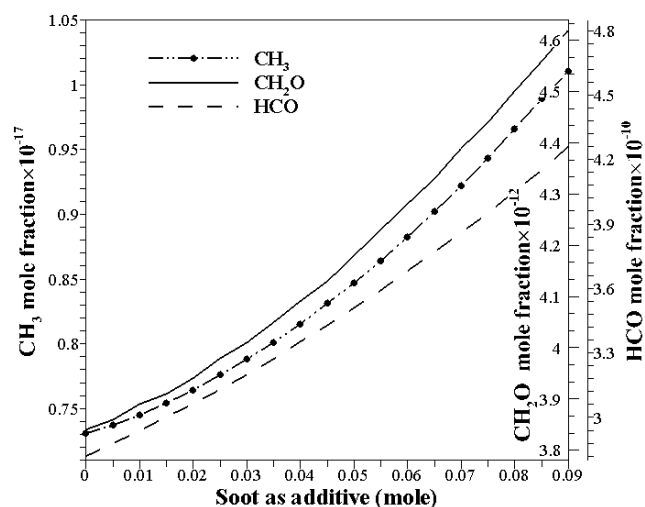


Fig. 8. The effect of adding soot in gaseous state on CH_3 , CH_2O and HCO mole fractions

شکل ۸: تأثیر افزودن دوده با فرض حالت گازی بر کسر مولی گونه‌های CH_3 ، CH_2O و HCO

نمودار شکل ۹ اثر افزودن دوده با فرض حالت گازی را بر نرخ واکنش‌های ۹۸، ۱۰۱، ۱۶۶ و ۹۹ نشان می‌دهد. افزودن کربن از ۰/۰۱ تا ۰/۰۹ مول با کاهش مول سوخت به همان میزان موجب افزایش ۴۲ درصدی نرخ واکنش ۹۸ و افزایش ۶۶ درصدی نرخ واکنش ۱۰۱ می‌شود. لازم به ذکر است بررسی اثر افزودن دوده با فرض حالت گازی بر ثابت تعادل این دو واکنش نشان‌دهنده مرتبه بالای مقادیر آن‌ها بوده (میانگین ثابت تعادل واکنش‌های ۹۸ و ۱۰۱ به ترتیب ۱۳۰/۵ و ۳۸۲۸/۷ است) لذا با توجه به رابطه ثابت تعادل، این دو واکنش کامل بوده و در جهت رفت و تولید کامل محصولات پیش می‌روند. از این رو می‌توان نتیجه گرفت افزودن دوده با افزایش نرخ واکنش ۹۸ موجب تجزیه بیشتر سوخت و تولید متیل بیشتر خواهد شد، همچنین افزایش نرخ واکنش شماره ۱۰۱ نشان‌دهنده افزایش فعالیت رادیکال OH، تجزیه بیشتر CH_2O و تولید فرمیل بیشتر در اثر افزودن دوده با فرض حالت گازی است. از طرفی ترکیب فرمیل با رادیکال‌های H_2O ، M و O نقش اساسی در روند نهایی واکنش‌های

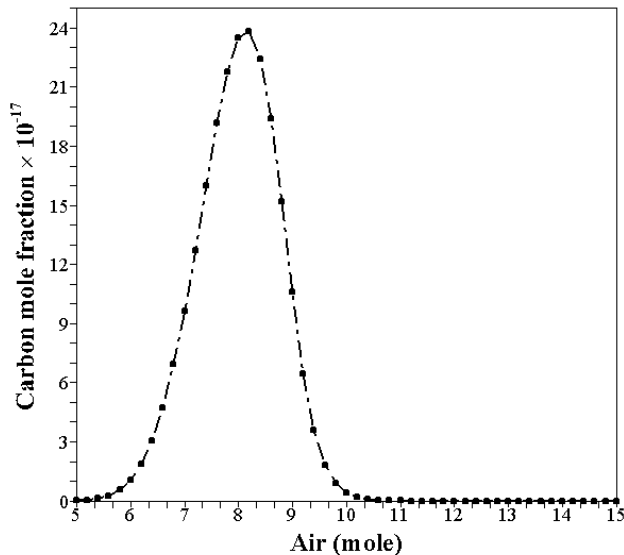


Fig. 11. The variation of carbon mole fraction by air in methane-air combustion

شکل ۱۱: تغییرات کسر مولی کربن در اثر تغییر مول هوا (نسبت هوا به سوخت)

متعددی تبدیل شده در اولین گام موجب شده تا در ورودی سوخت و هوا در عین ثبات جرم، مقدار عددی مول ورودی افزایش یابد. این افزایش مول شامل رادیکال‌های فعالی است که تأثیرات قابل توجهی بر پیشروی واکنش‌های احتراقی داشته و مقدار عددی آنتالپی واکنش را بهبود می‌بخشد. شکل ۱۲ اثر افزودن محصولات احتراق ناقص بر دمای آدیاباتیک شعله

جدول ۲: کسر مولی محصولات احتراق ناقص متان به‌عنوان افزودنی در ترکیب ۵ درصد محصولات احتراق ناقص و ۹۵ درصد سوخت متان

Table 2. The mole fractions of methane-air incomplete combustion products for 0.05 mole methane as additive to 0.95 mole methane combustion

کسر مولی	گونه	کسر مولی	گونه
$1/26 \times 10^{-7}$	N_2O	$7/15 \times 10^{-1}$	N_2
$5/23 \times 10^{-8}$	H_2O_2	$8/14 \times 10^{-2}$	CO_2
$9/44 \times 10^{-9}$	HNO	$1/62 \times 10^{-1}$	H_2O
$1/84 \times 10^{-10}$	N	$2/79 \times 10^{-2}$	O_2
$3/04 \times 10^{-11}$	NH_3	$9/18 \times 10^{-3}$	Ar
$2/74 \times 10^{-11}$	NNH	$2/33 \times 10^{-3}$	NO
$1/92 \times 10^{-11}$	NH	$1/23 \times 10^{-3}$	OH
$6/87 \times 10^{-12}$	NH_2	$4/19 \times 10^{-4}$	CO
$6/50 \times 10^{-12}$	$HNCO$	$1/91 \times 10^{-4}$	H_2
$2/80 \times 10^{-12}$	HCO	$7/54 \times 10^{-5}$	O
$1/60 \times 10^{-13}$	NCO	$1/6 \times 10^{-6}$	NO_2
$3/57 \times 10^{-14}$	CH_2O	$6/5 \times 10^{-7}$	HO_2
$1/25 \times 10^{-14}$	HCN	$1/59 \times 10^{-8}$	H

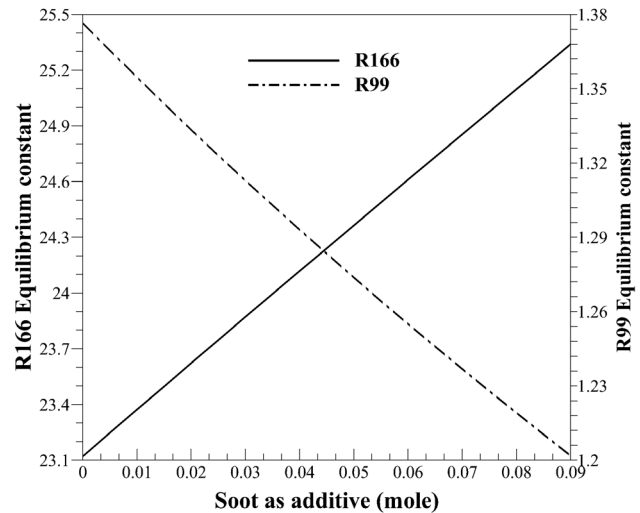


Fig. 10. The effect of adding soot in gaseous state on equilibrium constant and rate of reaction No. 99

شکل ۱۰: تأثیر افزودن دوده با فرض حالت گازی بر ثابت تعادلی و نرخ واکنش ۱۶۶

دی‌اکسید کربن را بهبود نبخشیده بلکه موجب کاهش کسر مولی آن (۰/۲۱ درصدی) نیز می‌شود. همان‌طور که بیان شد تغییرات ثابت تعادل تنها وابسته به تغییرات دمای واکنش است و نتایج نشان می‌دهد افزودن کربن با افزایش دمای احتراق موجب کاهش ثابت تعادل واکنش ۹۹ شده که با توجه به ماهیت گرمازا بودن این واکنش، افزایش دمای احتراق در اثر افزودن دوده موجب شده تا تجزیه دی‌اکسید کربن در واکنش برگشت افزایش یابد و کاهش ثابت تعادل و کسر مولی این گونه را به همراه داشته باشد [۲۷]. با توجه به روند موردبررسی در سه واکنش پیشین، نرخ تولید مونواکسید کربن در فرایند احتراق با افزودن دوده با فرض حالت گازی رشد چشمگیری داشته و در حالت افزودن ۰/۰۹ مول دوده رشد ۵۳ درصدی را خواهد داشت.

۳-۳- افزودن محصولات احتراق ناقص

کد محاسباتی برای تعیین مقدار هوای موردنیاز (مقدار x در شکل ۱) برای تولید حداکثر دوده در واکنش احتراق ناقص بر مبنای محیط نرم‌افزار متلب و کد کانترا محاسبه شده است. حد اشتعال برای متان بین ۵ تا ۱۵ بوده [۲۸] که شکل ۱۱ تغییرات کسر مولی کربن را به ازای بازه حد اشتعال متان نمایش می‌دهد. در نسبت هوا به سوخت حجمی ۸/۲ واکنش احتراق ناقص شامل بیشترین میزان دوده خواهد بود. لذا ۵۳ محصول احتراق ناقص در نسبت x به α برابر با ۸/۲ به‌عنوان محصولات احتراق ناقص به ورودی سوخت افزوده خواهد شد. شرح این محصولات و کسر مولی آن‌ها در حالت ۰/۰۵ مول سوخت در احتراق ناقص ($\alpha=0/05$ و $x=0/41$) در جدول ۲ قابل مشاهده است. شایان‌ذکر است در محصولات احتراق ناقص متان، ۲۷ گونه دیگر نیز موجود بوده که کسر مولی آن‌ها کمتر از 10^{-15} است.

افزودن محصولات احتراق ناقص که در آن سوخت تجزیه و به گونه‌های

1 Creation Rate (kmol/m³.s)

بررسی کسر مولی گونه‌های CH_3 ، CH_2O و HCO نیز شامل نتایج مشابهی است. شکل ۱۴ تغییرات کسر مولی این سه گونه را در اثر افزودن محصولات احتراق ناقص نشان می‌دهد. نکته قابل توجه در این نمودار، افت شدید کسر مولی این سه گونه مهم زنجیره احتراق است که علت آن را می‌توان در تغییرات کمیت‌های سینتیکی واکنش‌های زنجیره‌ای جست‌وجو کرد.

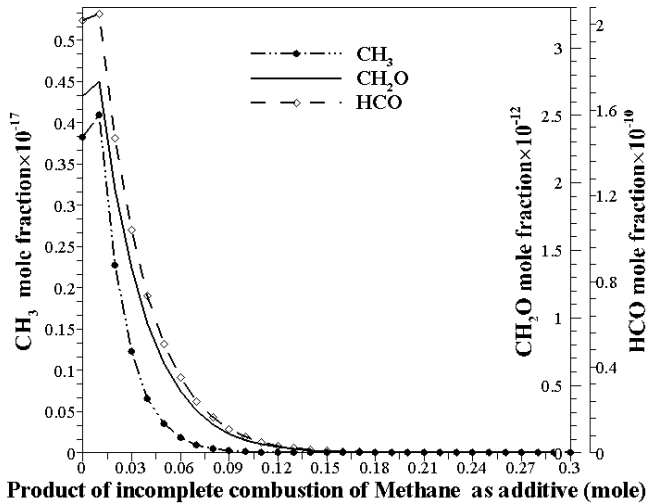


Fig. 14. The effect of methane-air incomplete combustion products as additive on CH_3 , CH_2O and HCO mole fractions

شکل ۱۴: تأثیر افزودن محصولات احتراق ناقص متان بر کسر مولی گونه‌های CH_3 ، CH_2O ، HCO

در روند بررسی پیشروی سینتیکی احتراق با افزودن محصولات احتراق ناقص، شکل ۱۵ تغییرات نرخ واکنش‌های ۹۸، ۹۹، ۱۰۱، ۱۶۶ و ۹۹ را نشان می‌دهد. افزودن محصولات احتراق ناقص موجب افت قابل ملاحظه مقادیر نرخ واکنش خواهد شد و به‌طور کلی می‌توان عنوان کرد افزودن ۰/۱۵ مول از محصولات احتراق ناقص موجب ایجاد اختلال در روند واکنش خواهد شد. لذا علت کاهش شدید کسر مولی گونه‌های CH_3 ، CH_2O و HCO را می‌توان نتیجه‌ای از کاهش نرخ واکنش‌های زنجیره‌ای ۹۸ و ۱۰۱ در اثر افزودن محصولات احتراق ناقص دانست. شکل ۱۶ اثر افزودن محصولات احتراق ناقص بر ثابت تعادلی واکنش ۱۶۶ و ۹۹ را نشان می‌دهد.

همان‌طور که در شکل ۱۵ مشاهده شد میزان نرخ واکنش ۱۶۶ با شیب قابل توجهی کاهش می‌یابد، همین شرایط برای ثابت تعادل این واکنش نیز حاکم بوده که به تبع آن نرخ تجزیه HCO و تشکیل CO در این شرایط کاهش خواهد یافت. لذا با توجه به نقش مهم این واکنش در تولید مونواکسید کربن، افزودن ۰/۱۵ مول از محصولات احتراق ناقص کسر مولی این آلاینده مخرب احتراق را در محصولات از $10^{-3} \times 4/89$ در حالت طبیعی احتراق متان به مقدار $10^{-4} \times 2/44$ کاهش داده و افت بیش از ۹۰ درصدی آن را به همراه خواهد داشت.

و کسر مولی گونه NO را نمایش می‌دهد. افزودن ۰ تا ۰/۳ مول محصولات احتراق ناقص (با کاهش مول سوخت به همان اندازه) موجب کاهش دمای آدیاباتیک شعله از ۲۱۸۰ K تا ۱۵۹۲ K خواهد شد. این کاهش با افت تولید NO حرارتی موجب کاهش ۶۹ درصدی کسر مولی مونواکسید نیتروژن می‌شود.

تغییرات کسر مولی دو گونه مهم CO و CO_2 در اثر افزودن محصولات احتراق ناقص در شکل ۱۳ ترسیم شده است. افزودن ۰/۳ مول از محصولات احتراق ناقص موجب کاهش ۱۳ درصدی کسر مولی دی‌اکسید کربن شده و افزودن ۰/۱۵ مول از محصولات احتراق ناقص کسر مولی مونواکسید کربن را بیش از ۹۰ درصد کاهش می‌دهد.

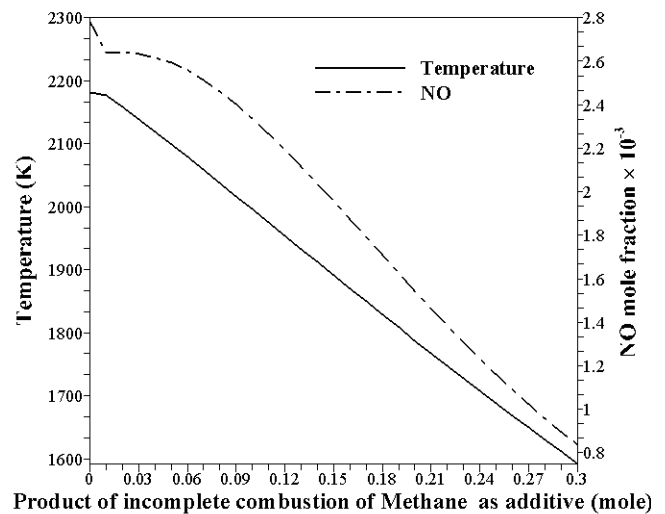


Fig. 12. The effect of methane-air incomplete combustion products as additive on adiabatic flame temperature and NO mole fraction

شکل ۱۲: تأثیر افزودن محصولات احتراق ناقص متان بر دمای آدیاباتیک و کسر مولی گونه NO

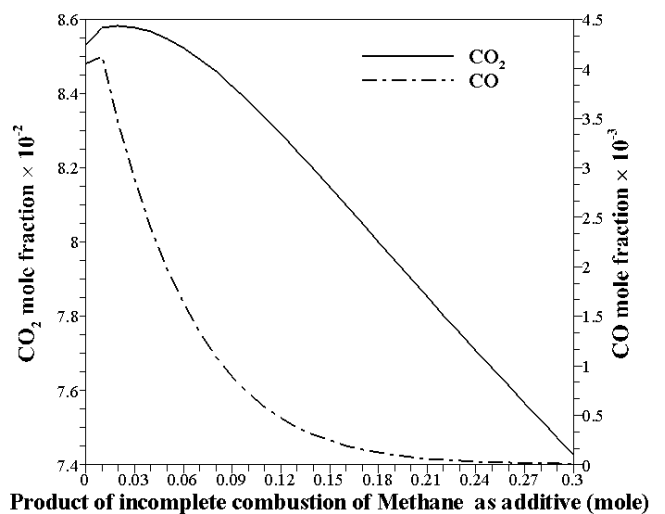


Fig. 13. The effect of methane-air incomplete combustion products as additive on CO and CO_2 mole fractions

شکل ۱۳: تأثیر افزودن محصولات احتراق ناقص متان بر کسر مولی گونه‌های CO_2 و CO

افزودن محصولات احتراق ناقص، موجب افت شدید پیشروی کلی فرایند احتراق می‌شود و می‌توان این استدلال را در نتایج کسر مولی مربوط به گازهای اصلی تشکیل‌دهنده هوا (اکسیژن، نیتروژن) در محصولات خروجی مشاهده نمود.

شکل ۱۷ تغییرات کسر مولی دو گونه اکسیژن و نیتروژن را در محصولات خروجی با افزودن محصولات احتراق ناقص نشان می‌دهد. با افزودن این محصولات، کسر مولی عناصر اکسیژن و نیتروژن در محصولات خروجی افزایش یافته و با توجه به کاهش کسر مولی مونواکسید و دی‌اکسید کربن می‌توان نتیجه گرفت واکنش احتراق به سمت ناقص‌تر انجام شدن پیش می‌رود. این موضوع به صورت سینتیکی افت دمای احتراق در اثر اضافه نمودن محصولات احتراق ناقص را توجیه می‌نماید.

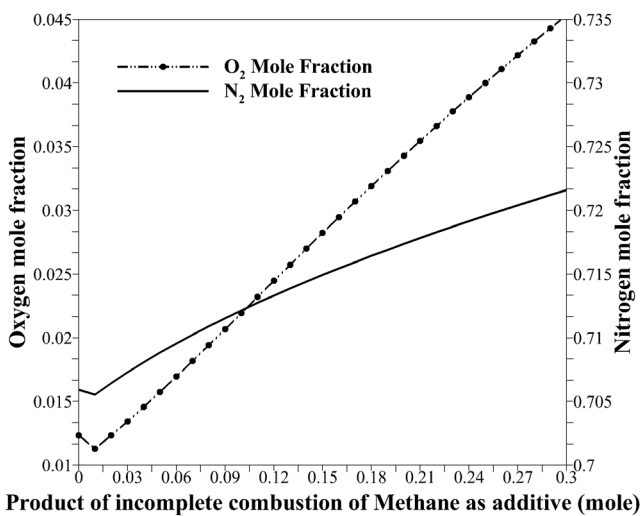


Fig. 17. The effect of methane-air incomplete combustion products as additive on air species in methane-air combustion products

شکل ۱۷: تأثیر افزودن محصولات احتراق ناقص متان بر کسر مولی عناصر تشکیل‌دهنده هوا

لازم به ذکر است تغییرات ناهمگن در بازه بین ۰/۰۱ الی ۰/۰۱ مول افزودن محصولات احتراق ناقص در تمامی نمودارها به دلیل تغییرات نسبت هوا به سوخت ورودی پس از افزودن محصولات ناقص رخ می‌دهد که با توجه به احتراق طبیعی متان برای ۱۵ درصد هوای اضافی تنظیم شده است.

۴- نتیجه‌گیری

مطالعه سینتیکی احتراق گاز طبیعی در اثر افزودن دوده با فرض حالت گازی و محصولات احتراق ناقص در فضای صفر بعدی، توسط مکانیزم GRI3.0 و روش EPM به‌وسیله کدهای کانترا در محیط متلب انجام گردید؛ در این مدل‌سازی فرض رفتار گازی برای ذرات کربن اعمال و تغییرات چگالی آن‌ها در فضای احتراق توسط معادله گاز کامل مدل و بر اساس آن نتایج زیر حاصل شد.

- مقایسه نتایج کد حاضر با نتایج زی و همکاران [۱۰] نشان می‌دهد،

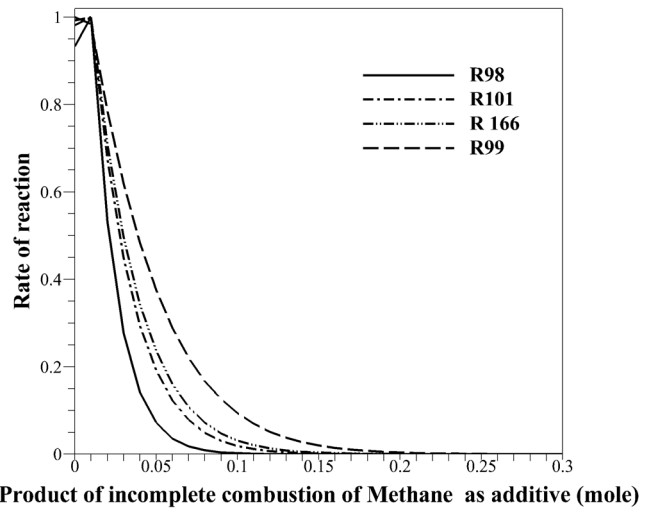


Fig. 15. The effect of methane-air incomplete combustion products as additive on rate of reactions No. 98 and 101

شکل ۱۵: تأثیر افزودن محصولات احتراق ناقص متان بر نرخ واکنش‌های ۹۸ و ۱۰۱

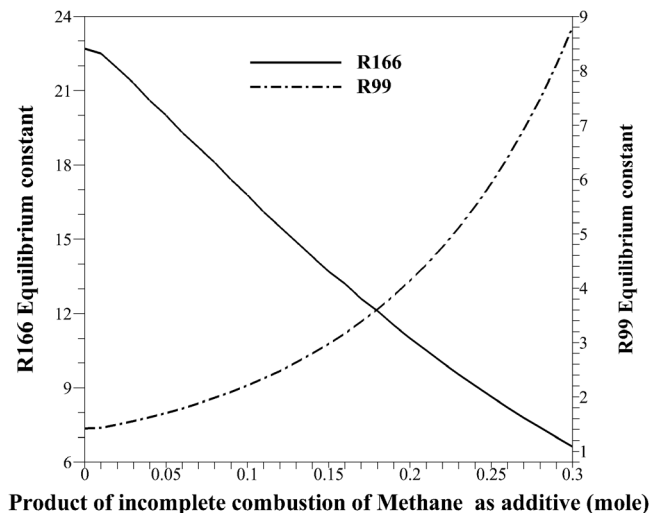


Fig. 16. The effect of methane-air incomplete combustion products as additive on equilibrium constant and rate of reaction 166

شکل ۱۶: تأثیر افزودن محصولات احتراق ناقص متان بر ثابت تعادل و نرخ واکنش ۱۶۶

کاهش کسر مولی رادیکال فرمیل و گونه مونواکسید کربن بر مسیر اصلی واکنش‌های زنجیره‌ای تأثیرگذار بوده و محصولات نهایی واکنش را نیز دستخوش تغییر خواهد نمود. بررسی تغییرات ثابت تعادل و نرخ واکنش ۹۹ در اثر افزودن محصولات احتراق ناقص نشان می‌دهد در گام اول افزودن محصولات احتراق ناقص موجب افزایش ثابت تعادل واکنش شده و مقدار آن را از ۱/۴ به ۸/۸ می‌رساند. این افزایش ۶ برابری ثابت تعادل موجب پیشبرد واکنش در جهت رفت شده و آن را به سمت یک واکنش کامل (تولید کامل محصولات) سوق می‌دهد؛ اما افت شدید نرخ واکنش این افزایش ثابت تعادل را تحت تأثیر قرار داده، لذا در یک برآیند کلی کسر مولی گونه CO_2 با افزودن محصولات احتراق ناقص کاهش پیدا خواهد کرد.

ثابت تعادلی واکنش	K_p
تعداد مول‌های گونه	n_i
تعداد گونه‌ها	N
تابع ترکیبی	ζ
ضریب گونه k در معادله واکنش	λ_k
پتانسیل شیمیایی گونه i	μ_i
تعداد عناصر	M

منابع

- [1] L. Yan, G. Yue, B. He, Application of an efficient exponential wide band model for the natural gas combustion simulation in a 300 kW BERL burner furnace, *Applied Thermal Engineering*, 94 (2016) 209-220.
- [2] M.E. Biresselioglu, T. Yelkenci, I.O. Oz, Investigating the natural gas supply security: A new perspective, *Energy*, 80 (2015) 168-176.
- [3] B.W. Butler, M.K. Denison, B.W. Webb, Radiation heat transfer in a laboratory-scale, pulverized coal-fired reactor, *Experimental Thermal and Fluid Science*, 9(1) (1994) 69-79.
- [4] S.B.H.C. Neal, E.W. Northover, R.J. Preece, The measurement of radiant heat flux in large boiler furnaces—II. Development of flux measuring instruments, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 23(7) (1980) 1023-1031.
- [5] F.R. Centeno, C.V. da Silva, F.H.R. França, The influence of gas radiation on the thermal behavior of a 2D axisymmetric turbulent non-premixed methane-air flame, *Energy Conversion and Management*, 79 (2014) 405-414.
- [6] P.J. Coelho, Numerical simulation of the interaction between turbulence and radiation in reactive flows, *Progress in Energy and Combustion Science*, 33(4) (2007) 311-383.
- [7] F.R. Centeno, R. Brittes, F.H.R. França, C.V. da Silva, Application of the WSGG model for the calculation of gas-soot radiation in a turbulent non-premixed methane-air flame inside a cylindrical combustion chamber, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 93 (2016) 742-753.
- [8] S.H. Pourhoseini, M. Moghiman, Effect of pulverized anthracite coal particles injection on thermal and radiative characteristics of natural gas flame: An experimental study, *Fuel*, 140 (2015) 44-49.
- [9] S.R. Rockwell, A.S. Rangwala, Influence of coal dust

تحلیل صفر بعدی و فرض رفتار گازی برای ذرات دوده برای ذرات با قطر بین ۰ الی ۲۵ میکرون از دقت قابل قبولی برخوردار است.

- افزودن دوده با فرض حالت گازی به احتراق متان با افزایش نرخ واکنش‌های زنجیره‌ای احتراق متان، روند پیشروی واکنش را تسریع بخشیده و نرخ تولیدی گونه‌های مهم زنجیره واکنش از قبیل CH_3 ، CH_2O و HCO را افزایش می‌دهد (افزودن دوده با فرض حالت گازی از ۰/۰۱ تا ۰/۰۹ مول (با کاهش مولی سوخت به همان میزان) باعث افزایش ۳۸ درصدی کسر مولی CH_3 ، افزایش ۲۰ درصدی کسر مولی CH_2O و افزایش ۴۵ درصدی کسر مولی HCO می‌شود).
- افزودن دوده با فرض حالت گازی با افزایش نرخ و ثابت تعادل واکنش ($\text{H}_2\text{O} + \text{HCO} \leftrightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{H}_2\text{O}$) و همچنین افزایش کسر مولی فرمیل موجب تولید بیشتر آلایند CO خواهد شد (با افزودن ۰/۰۹ مول دوده، افزایش ۱۷ درصدی در کسر مولی CO مشاهده می‌شود) و در مهم‌ترین گام، کاهش روند تبدیل CO به CO_2 را به دلیل افزایش دما و تجزیه دوباره CO_2 تولیدی در واکنش $\text{CO} + \text{OH} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$ به همراه خواهد داشت (کاهش ۱۱ درصدی ثابت تعادل و افزایش ۵۳ درصدی نرخ واکنش ۹۹ با افزودن ۰/۰۹ مول دوده). از سوی دیگر افزایش دما در اثر افزودن دوده (افزودن صفر تا ۰/۰۹ مول نسبت به یک مول سوخت موجب افزایش دمای آدیاباتیک شعله از ۲۱۹۴ به ۲۲۵۹ کلوین خواهد شد)، رشد کسر مولی آلایند NO (افزایش ۵۳ درصدی) را نیز به همراه دارد.
- افزودن ۰/۱ مول محصولات احتراق ناقص با کاهش مولی سوخت به همان میزان، با کاهش ۹۰ درصدی نرخ واکنش تبدیل مونواکسید کربن به دی‌اکسید کربن (واکنش شماره ۹۹) موجب کاهش تولید آلایند CO شده و با ایجاد اختلال در روند پیشروی واکنش‌ها، دمای احتراق را کاهش داده که به طبع آن کاهش کسر مولی NO حاصل می‌شود.

با توجه به این نتایج می‌توان به منظور افزایش تابش شعله و همچنین کنترل آلاینده‌ها ترکیبی از افزودنی کربن و محصولات احتراق ناقص را به نحوی به واکنش اضافه نمود تا اهداف افزایش انتقال حرارت تابشی شعله در کنار کنترل آلاینده‌های خروجی محقق شود.

فهرست علائم

G	تابع انرژی آزاد گیبس
T	دما (بر واحد کلوین)
P	فشار (بر واحد پاسکال)
n	مقدار مول

- Energy*, 34(9) (2009) 3710-3716.
- [18] S.R. Turns, *An introduction to combustion*, McGraw-hill New York, 1996.
- [19] W.C. Reynolds, *The Element potential Method For Chemical Equilibrium Analysis : STANJAN Program*, Stanford University, 1986.
- [20] R.W.M. William R. Smith, *Chemical reaction equilibrium analysis : theory and algorithms University of Guelph*, 1982.
- [21] F.G.H. Ralph H. Petrucci, Jeffry D. Madura, Carey Bissonette, *General Chemistry: Principles and Modern Applications*, 10 ed., Pearson Prentice Hall, 2010.
- [22] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Gardiner, V.V. Lissianski, Z. Qin, , GRI-Mech 3.0, 2007.
- [23] S.R. Turns, *An introduction to combustion*, McGraw-hill New York, 1996.
- [24] D. Goodwin, *Cantera: object oriented software for reacting flows*, in, California Institute for Technology (Caltech), 2006.
- [25] K.C. Lück, G. Tsatsaronis, A study of flat methane-air flames at various equivalence ratios, *Acta Astronautica*, 6(3-4) (1979) 467-475.
- [26] K. Seshadri, A.L. Berlad, V. Tangirala, The structure of premixed particle-cloud flames, *Combustion and Flame*, 89(3) (1992) 333-342.
- [27] D.E. Winterbone, 14 - Chemical Kinetics, in: *Advanced Thermodynamics for Engineers*, Butterworth-Heinemann, Oxford, 1997, pp. 276-290.
- [28] C. Beyler, *SFPE Handbook of Fire Protection Engineering*, Springer, New York, 2016.
- on premixed turbulent methane-air flames, *Combustion and Flame*, 160(3) (2013) 635-640.
- [10] Y. Xie, V. Raghavan, A.S. Rangwala, Study of interaction of entrained coal dust particles in lean methane-air premixed flames, *Combustion and Flame*, 159(7) (2012) 2449-2456.
- [11] D. Bradley, Z. Chen, S. El-Sherif, S. El-Din Habik, G. John, G. Dixon-Lewis, Structure of laminar premixed carbon-methane-air flames and ultrafine coal combustion, *Combustion and Flame*, 96(1) (1994) 80-96.
- [12] D. Bradley, G. Dixon-Lewis, S. El-Din Habik, Lean flammability limits and laminar burning velocities of CH₄-air-graphite mixtures and fine coal dusts, *Combustion and Flame*, 77(1) (1989) 41-50.
- [13] D. Bradley, G. Dixon-Lewis, S. El-Din Habik, L.K. Kwa, S. El-Sherif, Laminar flame structure and burning velocities of premixed methanol-air, *Combustion and Flame*, 85(1-2) (1991) 105-120.
- [14] R.K. Eckhoff, Does the dust explosion risk increase when moving from μm-particle powders to powders of nm-particles, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 25(3) (2012) 448-459.
- [15] F.N. Egolfopoulos, Solid Fuel Burning in Steady, Strained, Premixed Flow Fields: The Graphite/Air/Methane System, *International Journal of Energy Research*, 24 (2000) 1257-1276.
- [16] K. Denbigh, *The Principles of Chemical Equilibrium: With Applications in Chemistry and Chemical Engineering*, Cambridge University Press, 1981.
- [17] M. Younessi-Sinaki, E.A. Matida, F. Hamdullahpur, Kinetic model of homogeneous thermal decomposition of methane and ethane, *International Journal of Hydrogen*

برای ارجاع به این مقاله از عبارت زیر استفاده کنید:

Please cite this article using:

A. Saeedi and R. Jalali Mehrabad, Effects of Adding Gaseous Soot and Methane Incomplete Combustion Products on Detailed Chemical Kinetics Combustion of Methane and Pollutants, *Amirkabir J. Mech. Eng.*, 50(6) (2018) 1277-1288.
DOI: 10.22060/mej.2017.12634.5385

