

مطالعه عددی شعله نفوذی جریان مخالف گاز طبیعی با رقیق‌سازی CO₂

جواد خادم* و علی اسدی**

دانشگاه بیرجند، دانشکده مهندسی مکانیک

(دریافت: ۱۳۹۰/۴/۱۱، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۰/۱۱/۱۷، پذیرش: ۹۰/۱۲/۸)

نظر به اینکه گاز طبیعی در بخش اعظم جهان صنعتی به یک منبع انرژی بسیار مهم تبدیل شده است، بررسی ساختار شعله و اثر آلاینده‌های آن بر محیط زیست امری ضروری و اجتناب ناپذیر است. در این مقاله، احتراق گاز طبیعی که ترکیبی از هیدروکربن‌هایی مانند CH₄، C₂H₆، C₃H₈ و نیز گازهای N₂، CO₂، O₂ و H₂ است، با استفاده از مدل شعله نفوذی جریان مخالف، بررسی شده است. در این تحقیق، منحنی‌های دما، غلظت گونه‌ها و ترکیبات NO_x با استفاده از حل عددی به دست آمده و اثر رقیق‌کننده CO₂ بر توزیع دما و نرخ تولید گونه‌ها بررسی شده است. با توجه به تکامل مناسب سازوکار GRI3.0 در مدل‌سازی احتراق گاز طبیعی، این سازوکار به عنوان سینتیک شیمیایی انتخاب شده است. افزایش رقیق‌ساز CO₂ در سوخت باعث کاهش دمای بیشینه احتراق می‌شود که این به دلیل کاهش غلظت واکنش‌دهنده‌ها و در نتیجه کاهش نرخ واکنش کلی است. رقیق‌ساز CO₂ همچنین بیشینه کسر مولی گونه‌های آلاینده C₂H₂ و NO را کاهش می‌دهد.

کلیدواژه: شعله نفوذی، جریان مخالف، احتراق گاز طبیعی، رقیق‌سازی، شبیه‌سازی

مقدمه

شعله‌های ساکن، مانند شعله‌های انتشاری، به طور کلی به دو دسته طبقه‌بندی می‌شوند که عبارت‌اند از شعله‌های پیش‌آمیخته و نفوذی. در شعله‌های پیش‌آمیخته، سوخت و اکسیدکننده قبل از ورود به ناحیه واکنش مخلوط می‌شوند. معمولاً، گازهای شعله‌های پیش‌آمیخته پتانسیل شیمیایی بالایی دارند که به طور ناگهانی در ناحیه واکنش کاهش می‌یابد. در شعله نفوذی، سوخت و اکسیدکننده در ابتدا از هم جدایند و واکنش‌دهنده‌ها، در همان منطقه‌ای که واکنش رخ می‌دهد، ترکیب می‌شوند. در شعله نفوذی، بر خلاف شعله پیش‌آمیخته، پتانسیل شیمیایی کمتری داریم. بنابراین، شعله‌های نفوذی، در احتراق، با شعله‌های پیش‌آمیخته متفاوت‌اند، زیرا احتراق در سطح بین سوخت و اکسیدکننده اتفاق می‌افتد و فرآیند سوختن بیشتر به نرخ نفوذ سوخت و اکسیدکننده بستگی دارد تا نرخ واکنش‌های شیمیایی.

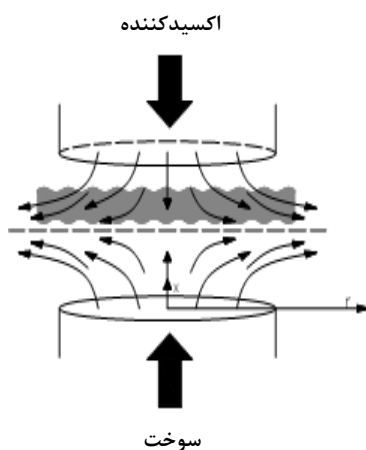
شعله جریان مخالف به وسیله برخورد دو فواره (Jet) پایدار سوخت و اکسیدکننده با جهت مخالف تشکیل می‌شود (شکل ۱). در این حالت، صفحه تخت شعله عمود بر محور نازل است. به علت سرعت متغیر در دهانه مشعل و سایر تاثیرات فرعی، اغلب شعله‌ها صاف (تخت) نیستند و فرض می‌شود که حلقه تختی از شعله داریم.

مطالعات بسیاری روی تئوری شعله‌های نفوذی صورت گرفته است. در ابتدا، هدف محاسبه شکل و به‌ویژه طول شعله‌های ایجادشده از فواره‌های گازی سوخت خارج‌شده به محیط هوای ساکن بود. اصول اولیه تئوری شعله نفوذی جریان مخالف توسط بورک و شومان [۱] و سپس به وسیله وهل، گزلی و کپ [۲]، هائل و هاوتورن [۳]، فای [۴] و دیگران ارائه شد. فرضیات اصلی عبارت‌اند از:

* استادیار (ایمیل: jkhadem49@yahoo.com)

** دانشجوی کارشناسی ارشد- نویسنده مخاطب (ایمیل: aliasadi450@gmail.com)

- خواص ترمودینامیکی اجزای شیمیایی و چگالی تابع دماست.
- معادلات در سیستم مختصات متقارن محوری نوشته می‌شوند.
- مسئله پایدار و جریان تراکم‌پذیر به همراه واکنش‌های شیمیایی است.
- شعله در طول یک سطح اتفاق می‌افتد و در حالت استوکیومتریک قرار دارد.
- مصرف واکنش‌دهنده‌ها در شعله خیلی سریع‌تر از نرخ فراهم‌شدن آن‌ها به وسیله نفوذ است.
- فشار محیط، که احتراق در آن صورت می‌گیرد، ثابت است.
- از تشعشع صرف‌نظر می‌شود.



شکل ۱- هندسه متقارن محوری جریان مخالف نفوذی

جیل‌ساه و آرویند آتیا [۵] اثر بخار آب روی جریان‌های مخالف نفوذی را بررسی کردند و دریافتند که به جز دو اثر فیزیکی بخار آب، یعنی خنک‌سازی و خاموش‌کنندگی به وسیله رقیق‌سازی اکسیدکننده یا سوخت، اثر سومی نیز وجود دارد و آن افزایش واکنش‌های شیمیایی داخل شعله‌ها با بخار آب است. آن‌ها ساختار جزئی شعله‌های نفوذی جریان مخالف با بخار آب را اندازه‌گیری کردند تا بررسی شود که چه اتفاقی در داخل شعله می‌افتد و چگونه واکنش‌ها افزایش می‌یابند. زنگ و همکارانش [۶] اشتعال هیدروژن-هوای پیش‌آمیخته به وسیله جریان‌های مخالف گرم‌شده را بررسی کردند. آن‌ها اثر نسبت هم‌ارزی را روی دمای اشتعال، در فشار ۱ atm و نرخ کرنش 390 s^{-1} بررسی کردند و دریافتند که در ترکیب رقیق و بیشتر از $\phi = 0.2$ دمای اشتعال با افزایش نسبت هم‌ارزی افزایش می‌یابد. برای ترکیب رقیق $\phi \leq 0.15$ ، نرخ واکنش به اندازه کافی سریع نیست تا باعث ایجاد احتراق شود. آن‌ها همچنین اثر نرخ کرنش بر دمای احتراق را بررسی کردند و نشان دادند که با افزایش نرخ کرنش دمای احتراق افزایش می‌یابد. اثر افزایش اکسیژن به مرز داغ، در تحقیق مذکور، به صورت کاهش دمای احتراق نمایان شد.

مطالعات زیادی بر روی متغیرهای مختلف مسئله از جمله ساختار شعله، سرعت شعله، فشار محیط، دمای شعله بی‌دررو (Adiabatic flame temperature)، دما و سرعت جریان‌های ورودی انجام شده است. در این مطالعات، عموماً سوخت ورودی بر پایه یک گاز بیان می‌شود، اما در تحقیقات اخیر محققان [۷] مدل را با ترکیب دوگاز، به عنوان گاز ورودی، بررسی کرده‌اند. در ادامه کار محققان و نیز با توجه به اهمیت گاز طبیعی در مصارف صنعتی، این گاز به صورت ترکیبی از هفت گاز C_2H_6 ، CH_4 ، H_2 ، CO_2 ، C_3H_8 و N_2 به عنوان سوخت ورودی در نظر گرفته می‌شود. اثر رقیق‌ساز CO_2 بر ساختار شعله و آلاینده‌های آن بررسی و متغیرهای مهم شعله مانند سرعت جریان‌های ورودی، نرخ کرنش، فشار محیط و دما مطالعه می‌شوند. این تحقیق ما

را در درک بهتر اثر رقیق‌سازها (به‌ویژه CO₂) بر ساختار شعله و سازوکار کاهش میزان تولید آلایندهایی مانند NOx و دوده یاری می‌کند و نیز چگونگی تغییر حدود خاموشی شعله در حضور رقیق‌ساز را نشان می‌دهد.

محاسبات عددی

معادلات حاکم برای هندسه جریان مخالف نفوذی، که در شکل ۱ نشان داده شده‌است، به شرح زیر است:
معادله بقای جرم:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho v r) = 0 \quad (1)$$

که در آن u و v مولفه‌های سرعت محوری و شعاعی و ρ چگالی سیال است. با استفاده از تعریف تابع جریان ψ [۸] به شکل زیر داریم:

$$\psi(r, x) = r^2 F(x) \quad (2)$$

لذا:

$$\rho u r = \frac{\partial \psi}{\partial r} = 2rF(x) \quad (3)$$

$$-\rho v r = \frac{\partial \psi}{\partial x} = r^2 \frac{dF(x)}{dx} \quad (4)$$

در نتیجه:

$$\frac{dF(x)}{dx} = -\frac{\rho v}{r} \quad \& \quad F(x) = \frac{\rho u}{2} \quad (5)$$

که در آن u و ρ توابعی فقط از x هستند. تابع $G(x)$ را به صورت زیر تعریف می‌کنیم.

$$G(x) = \frac{dF(x)}{dx} \quad (6)$$

معادلات تکانه (Momentum) محوری و شعاعی به صورت زیرند:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}(\rho u r) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho v r) &= \frac{\partial}{\partial r}(r \tau_{rx}) + r \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} - r \frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x r \\ \frac{\partial}{\partial x}(\rho u v r) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho v v r) &= \frac{\partial}{\partial r}(r \tau_{rr}) + r \frac{\partial \tau_{rx}}{\partial x} - r \frac{\partial P}{\partial r} \end{aligned} \quad (7)$$

که در آن $\tau_{xx} = \mu \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot V) \right]$ و $\tau_{rx} = \mu \left[2 \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial x} \right]$ ، $\tau_{rr} = \mu \left[2 \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot V) \right]$ معادلات بر حسب توابع F و G نتیجه می‌شود:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left[\frac{F^2}{\rho} - \mu \frac{d}{dx} \left(\frac{F}{\rho} \right) \right] + \frac{1}{2} \mu \frac{d}{dx} \left(\frac{G}{\rho} \right) - \frac{FG}{\rho} + \frac{1}{4} \left(\frac{\partial P}{\partial x} - \rho g_x \right) &= 0 \\ H - 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{FG}{\rho} \right) + \frac{3G^2}{\rho} + \frac{d}{dx} \left[\mu \frac{d}{dx} \left(\frac{G}{\rho} \right) \right] &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

که در آن

$$H = \frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial r} = \text{const} \quad (9)$$

طبق تعریف نرخ کرنش [۹]، که آن را با علامت a نیز نشان می‌دهند و معیاری از سرعت جریان‌های ورودی و فاصله بین دو نازل است، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\text{strain rate} = \frac{2V_{OX}}{L} \left(1 + \frac{V_f \sqrt{\rho_f}}{V_{OX} \sqrt{\rho_{OX}}} \right) \quad (10)$$

در این رابطه V_f ، V_{OX} و L به ترتیب چگالی سوخت، چگالی اکسیدکننده، سرعت سوخت، سرعت اکسیدکننده و فاصله‌ی بین دو نازل است.

معادلات انرژی و بقای گونه‌ها به صورت زیر است:

$$\rho u \frac{dT}{dx} - \frac{1}{C_p} \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) + \frac{\rho}{C_p} \sum_k C_{pk} Y_k V_k \frac{dT}{dx} + \frac{1}{C_p} \sum_k h_k \dot{\omega}_k = 0 \quad (11)$$

$$\rho u \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} (\rho Y_k V_k) - \dot{\omega}_k W_k = 0 \quad (12)$$

که سرعت نفوذی V_k در معادله (۷) از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$V_k = \frac{1}{X_k \bar{W}} \sum_{j=1}^K W_j D_{kj} \frac{dX_j}{dx} - \frac{D_k^T}{\rho Y_k} \frac{1}{T} \frac{dT}{dx} \quad (13)$$

یا به شکل فرمولاسیون میانگین برای ترکیب داریم:

$$V_k = \frac{1}{X_k} D_{km} \frac{dX_k}{dx} - \frac{D_k^T}{\rho Y_k} \frac{1}{T} \frac{dT}{dx} \quad (14)$$

که

$$D_{km} = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / D_{jk}} \quad (15)$$

و همچنین D_{kj} ، D_{km} ، D_{jk} ، D_k^T ، X و \bar{W} به ترتیب ضرایب چندجزئی، میانگین ترکیب، دوتایی، نفوذ حرارتی، کسر مولی گونه‌ها و وزن مولکولی‌اند.

شرایط مرزی برای جریان‌های سوخت (F) و اکسیدکننده (O) در نازل‌ها مطابق زیر است.

$$\begin{aligned} x=0: \quad F &= \frac{\rho_F u_F}{2}, \quad G=0, \quad T=T_F, \quad \rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_F \\ x=L: \quad F &= \frac{\rho_O u_O}{2}, \quad G=0, \quad T=T_O, \quad \rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_O \end{aligned} \quad (16)$$

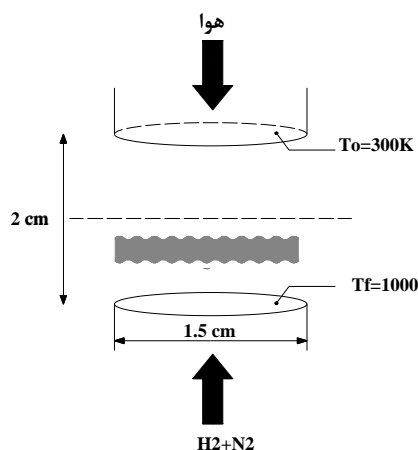
از شرایط مرزی ورودی، شار جرمی کلی شامل نفوذ و جابه‌جایی نسبت به کسر گونه‌ها ($Y_k = Y_{k,F}$) مشخص می‌شود. معادلات دیفرانسیلی (۶، ۸، ۹، ۱۱ و ۱۲) و شرایط مرزی (۱۶) یک مسئله مقدار مرزی را برای متغیرهای وابسته (Y_k, F, G, H, T) تشکیل می‌دهند. متغیرهای مهم مرتبط با این مسئله سرعت جریان‌های ورودی سوخت و اکسیدکننده، دمای جریان‌های ورودی سوخت و اکسیدکننده، نرخ کرنش و فشار محیط است.

انفصال این معادلات دیفرانسیلی مطابق روش‌های شناخته‌شده صورت می‌گیرد. ترم نفوذ با استفاده از طرح تفاضل مرکزی با خطای مرتبه دو در فاصله مش‌بندی منفصل می‌شود. برای ایجاد همگرایی بهتر در انفصال جمله جابه‌جایی از طرح آپ‌ویند، که قادر به تشخیص جهت جریان است، استفاده می‌شود. دقت این طرح از مرتبه یک است، اما از ایجاد نوسانات در طول حل روی مش‌بندی درشت جلوگیری می‌کند. حل معادلات با استفاده از کد OPPDIF [۱۰]، که یک کد عددی به زبان فرترن است، انجام گرفته است.

نتایج

اعتبارسنجی کد عددی OPPDIF

برای بررسی اعتبار کد عددی OPPDIF به مقایسه منحنی دمای احتراق هیدروژن-هوای رقیق‌شده با نیتروژن، که مهم‌ترین منحنی احتراق گاز در مدل شعله نفوذی جریان مخالف است، با منحنی دمای حاصل از نتایج عددی هو و آیساک [۱۱]، که به روش تبدیلات تشابهی انجام شده و نیز منحنی دمای حاصل از نتایج آزمایشگاهی پلت [۱۲]، که به روش طیف سنجی یکسان ضد ضربه رامن انجام شده است، می‌پردازیم. شکل ۲ مدل آزمایشگاهی را نشان می‌دهد.

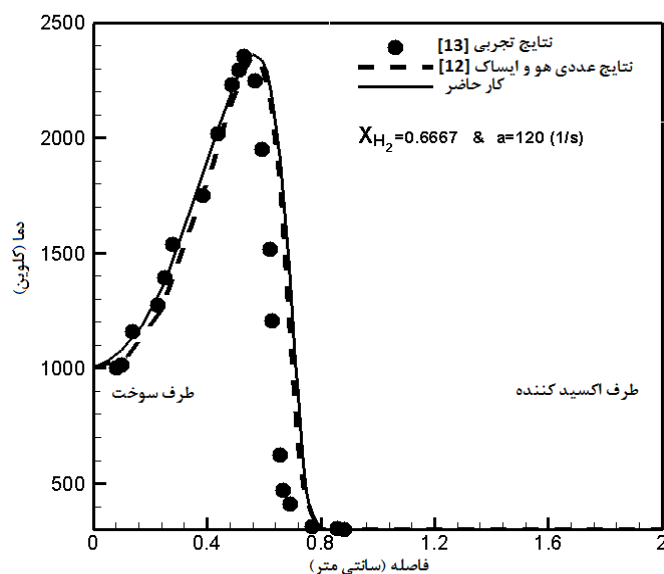


شکل ۲- مدل آزمایشگاهی

به بررسی دو حالت می‌پردازیم که در هر دو حالت دمای سمت سوخت ۱۰۰۰K و دمای سمت اکسیدکننده ۳۰۰K است.

حالت اول: $a = 120 \text{ s}^{-1}$ و $X_{H_2} = 0.6667$

شکل ۳ منحنی دما بر حسب فاصله در احتراق جریان مخالف نفوذی هیدروژن را برای حالت اول، که در آن کسر مولی هیدروژن ۰/۶۶۶۷ و نرخ کرنش 120 s^{-1} است، نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج عددی کار حاضر که به وسیله OPPDIF انجام شده و نتایج عددی هو و آیساک [۱۱] با دقت بسیار خوبی بر هم منطبق‌اند. نتایج هر دو کار عددی نیز با دقت خوبی بر نتایج آزمایشگاهی [۱۲] منطبق است.

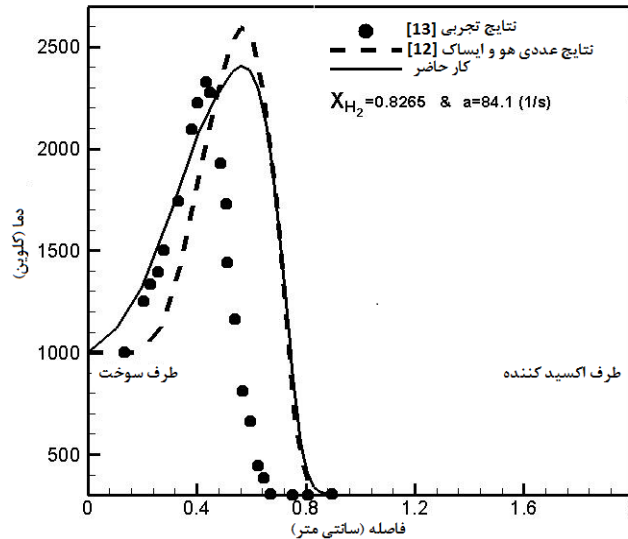


شکل ۳- منحنی دما بر حسب فاصله در احتراق جریان مخالف نفوذی هیدروژن برای حالت $a = 120 \text{ (1/s)}$ و $X_{H_2} = 0.6667$

حالت دوم: $a = 84 \text{ s}^{-1}$ و $X_{H_2} = 0.8265$

در حالت دوم، کسر مولی هیدروژن ۰/۸۲۶۵ و نرخ کرنش 84 s^{-1} است. منحنی دمای مربوط به این حالت در شکل ۴ آمده است. در این حالت نیز نتایج عددی با دقت خوبی بر هم و نیز بر نتایج آزمایشگاهی [۱۲] منطبق‌اند. حل عددی کار حاضر، نسبت به حل عددی هو و آیساک [۱۱] در این حالت، انطباق بهتری بر نتایج آزمایشگاهی دارد و بشینه دما را با دقت بیشتری

پیش‌بینی می‌کند. دمای بیشینه در نتایج عددی بیشتر از نتایج آزمایشگاهی است و علت آن را می‌توان در چشم‌پوشی از تشعشع دانست. بنابراین، حل عددی OPPDIF از دقت خوبی برخوردار بوده و می‌توان با اطمینان از آن برای مدل‌سازی مسئله کار حاضر استفاده کرد.



شکل ۴- منحنی دما بر حسب فاصله در احتراق جریان مخالف نفوذی هیدروژن برای حالت $X_{H_2} = 0.8265$ و $a = 84.1$ (1/s)

در ادامه، شبیه‌سازی احتراق گاز طبیعی برای چهار شعله، که در جدول ۱ آمده، اجرا شده است. فشار محیط ثابت و برابر ۱ atm در نظر گرفته می‌شود. سازوکار سینتیک شیمیایی مورد استفاده GRI3.0 [۱۳] با ۳۲۵ واکنش برگشت‌پذیر از ۵۳ گونه است. ترکیب گاز طبیعی مورد استفاده در این شبیه‌سازی در جدول ۲ آمده است.

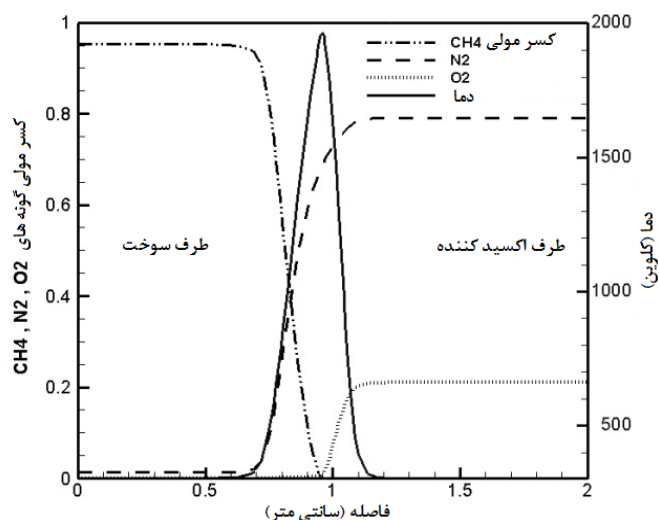
جدول ۱- مشخصات شعله‌های مدل‌سازی شده

حالت	درصد رقیق‌سازی CO ₂	دمای سوخت و اکسیدکننده (K)	سرعت سوخت و اکسیدکننده (cm/s)
۱	۰	۳۰۰	۱۰۰
۲	۵		
۳	۱۰		
۴	۱۵		

جدول ۲- ترکیب گاز طبیعی مورد استفاده در شبیه‌سازی

گونه‌ها	N ₂	O ₂	H ₂	CO ₂	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈
کسر مولی	۰/۰۱۳۱	۰/۰۰۰۲	۰/۰۰۰۱	۰/۰۰۷۰۷	۰/۹۵۲۳	۰/۰۲۵۲	۰/۰۰۲۰۳

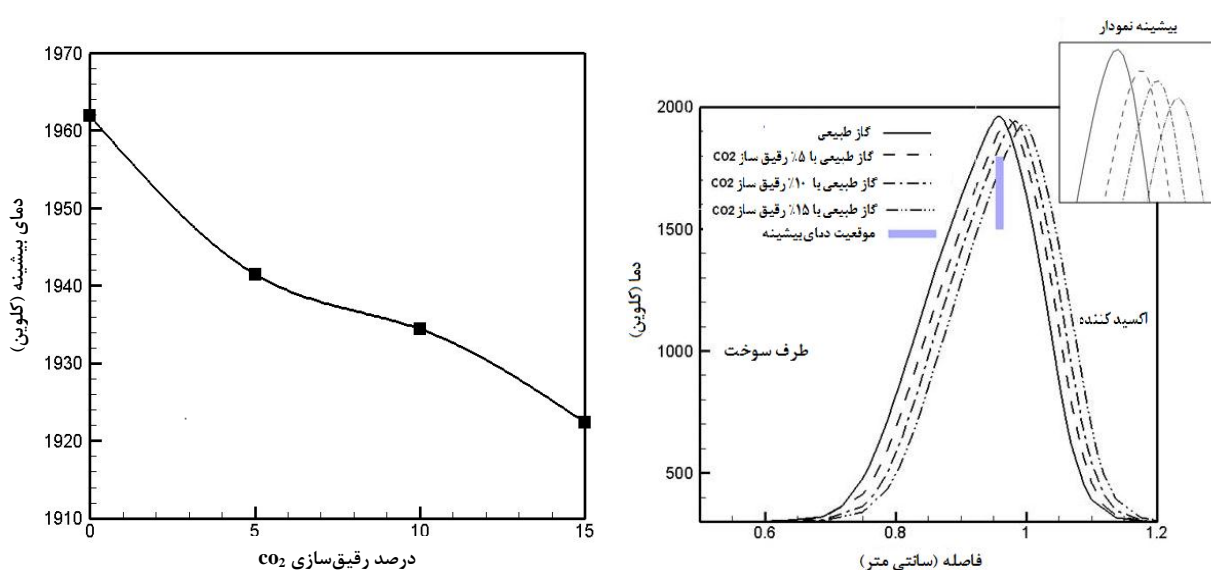
شکل ۵ کسر مولی گونه‌های CH₄، N₂ و O₂ و منحنی دمای مربوط به گاز طبیعی در حالت بدون رقیق‌سازی را نشان می‌دهد. دما در سمت ورودی سوخت ($x=0$ cm) و در سمت ورودی اکسیدکننده ($x=2$ cm) یکسان و برابر ۳۰۰ K است. با حرکت از سمت سوخت به سمت اکسیدکننده، به تدریج دما زیاد شده و در ناحیه شعله به بیشترین مقدار خود، که در حدود ۱۹۵۰ K است، می‌رسد. با توجه به برابری سرعت‌های ورودی سوخت و اکسیدکننده و نیز اینکه چگالی آن‌ها تقریباً برابر است، تکانه جریان‌های ورودی تقریباً برابر و در نتیجه بیشینه دما در وسط فاصله دو نازل ($x=1$ cm) اتفاق می‌افتد.



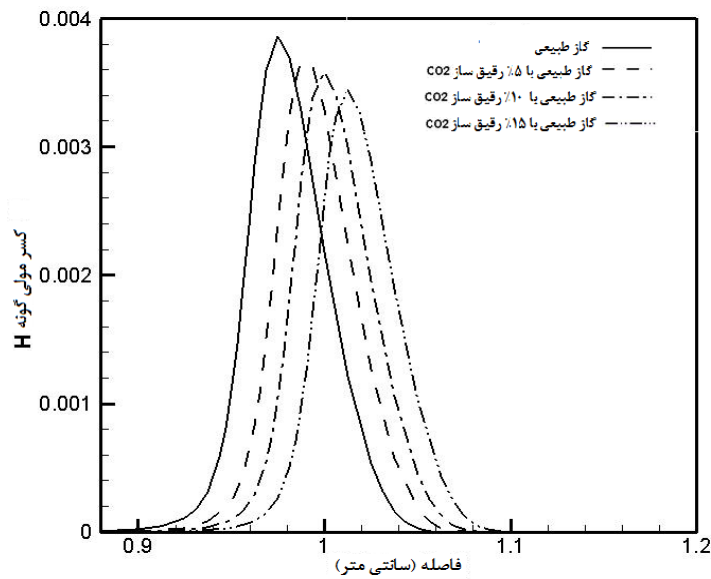
شکل ۵- کسر مولی گونه‌های CH_4 ، N_2 و O_2 و منحنی دما بر حسب فاصله برای حالت بدون رقیق‌سازی

اثر رقیق‌ساز بر دما

شکل‌های (۶-الف) و (۶-ب) نمودارهای دما بر حسب فاصله بین دو نازل و بیشینه دما بر حسب درصد رقیق‌ساز اضافه‌شده به سوخت را نشان می‌دهند. همان‌طور که پیداست، با افزایش درصد رقیق‌ساز، منحنی‌های دما کاهشی در بیشینه دما را تجربه می‌کنند و موقعیت بیشینه دما به سمت اکسیدکننده منتقل می‌شود. با افزایش رقیق‌ساز، غلظت واکنش‌دهنده‌ها کاهش یافته و بنابراین نرخ واکنش‌ها و در نهایت نرخ واکنش کلی کاهش می‌یابد که این کاهش نرخ واکنش به کاهش بیشینه دما منجر می‌شود. علت اصلی تغییر موقعیت بیشینه دما این است که با افزایش درصد رقیق‌کننده و نیز کاهش دما واکنش‌های شکست بین زنجیره‌های اتم‌های سوخت، که منجر به تولید رادیکال H می‌شود، کاهش یافته و در نتیجه از مقدار این رادیکال کاسته می‌شود. نتیجه آن است که سوخت کمتر تحت تاثیر رادیکال H قرار گرفته و می‌تواند در سمت اکسیدکننده نفوذ بیشتری داشته باشد. تغییر خواص حرارتی و انتقالی واکنش‌دهنده‌ها نیز به ایجاد این پدیده کمک می‌کند. شکل ۷ منحنی کسر مولی رادیکال H را در حضور رقیق‌کننده نشان می‌دهد.

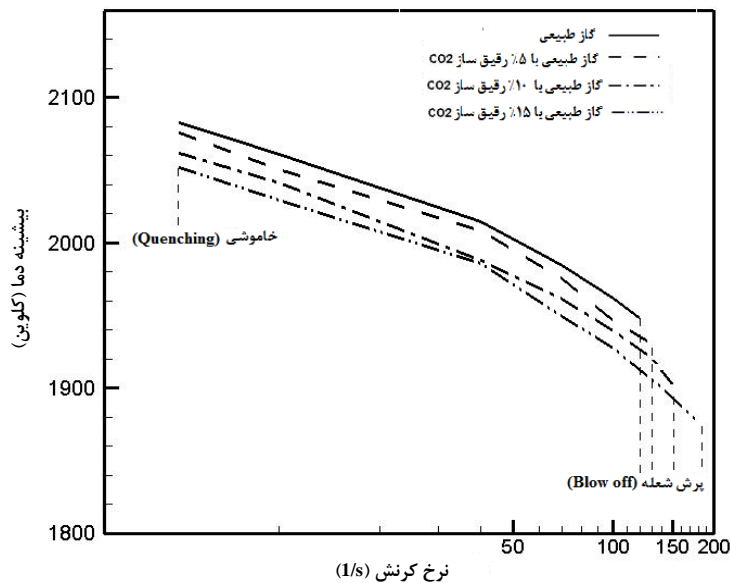


شکل ۶- الف: نمودار دما بر حسب فاصله در مقادیر مختلف رقیق‌سازی، ب: نمودار بیشینه دما بر حسب درصد رقیق‌ساز



شکل ۷- منحنی‌های کسر مولی H بر حسب فاصله در درصد‌های مختلف رقیق‌سازی

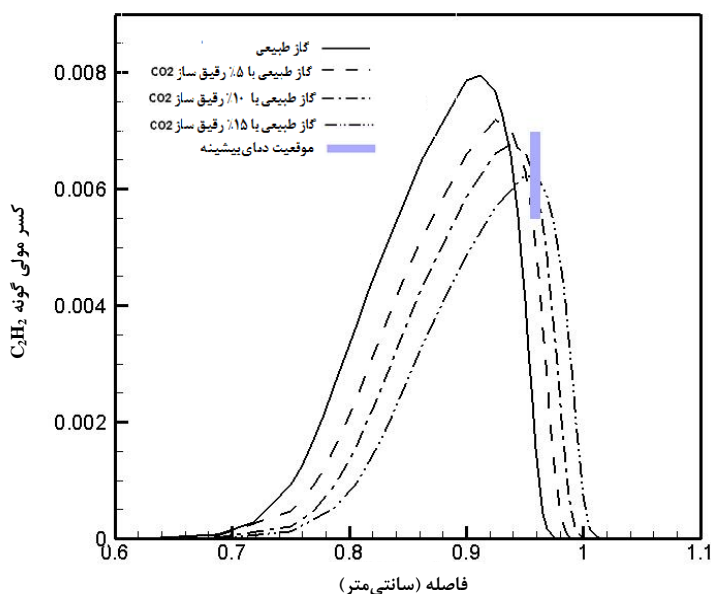
شکل ۸ منحنی دمای بیشینه بر حسب نرخ کرنش، در درصد‌های مختلف رقیق‌سازی با CO_2 ، را نشان می‌دهد. در یک درصد خاص رقیق‌کننده، با افزایش نرخ کرنش بیشینه دما کاهش می‌یابد و نیز در یک نرخ کرنش خاص دمای بیشینه، با افزایش درصد رقیق‌کننده، کاهش می‌یابد. نکته قابل توجه در اینجا این است که در شعله نفوذی دما با افزایش نرخ کرنش کاهش می‌یابد، اما در شعله پیش‌آمیخته [۶] دما با افزایش نرخ کرنش افزایش می‌یابد. نقطه ابتدایی هر یک از منحنی‌ها خاموشی (Quenching) و نقطه انتهایی آن پرش شعله (Blow off) نامیده می‌شود و به محدوده بین این دو حد، اشتعال‌پذیری اطلاق می‌شود. اشتعال‌پذیری، با افزایش درصد CO_2 ، افزایش می‌یابد. حضور بیش از اندازه واکنش‌دهنده‌ها در ناحیه واکنش باعث خاموشی شعله یا به اصطلاح خفگی می‌شود. افزایش نرخ کرنش تا حد خاصی باعث خاموشی می‌شود. این حد با افزایش رقیق‌ساز، که غلظت واکنش‌دهنده‌ها را کاهش می‌دهد، افزایش می‌یابد.



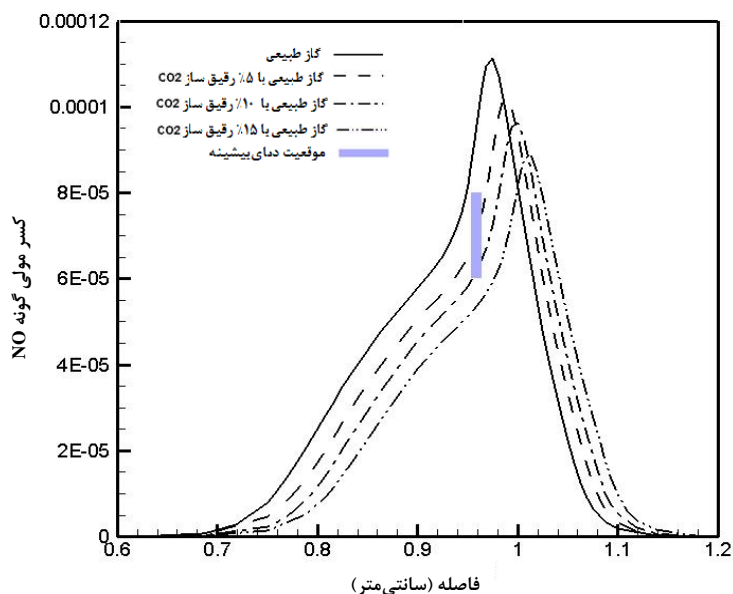
شکل ۸- نمودار بیشینه دما بر حسب نرخ کرنش در حضور رقیق‌ساز CO_2

اثر رقیق‌ساز بر تولید گونه‌های C_2H_2 و NO

در این قسمت اثر رقیق‌ساز بر گونه‌های C_2H_2 و NO ، که از اهمیت بیشتری برخوردارند، بررسی می‌شود. شکل‌های ۹ و ۱۰ کسر مولی گونه‌های C_2H_2 و NO را در حضور رقیق‌ساز، بر حسب فاصله، نشان می‌دهند. C_2H_2 یک پیش‌ماده مهم در تشکیل دوده است و NO یک آلاینده زیست‌محیطی به شمار می‌رود. همان‌طور که در این دو شکل مشخص است، بیشینه تولید این دو گونه، با افزایش درصد CO_2 ، کاهش می‌یابد که مطلوب است. این افزایش حرکت بیشینه کسر مولی گونه‌ها به سمت اکسیدکننده را نیز منجر می‌شود که دلیل این تغییر موقعیت، همان‌طور که پیشتر گفته شد، نفوذ بیشتر سوخت به سمت اکسیدکننده است.



شکل ۹- نمودار کسر مولی گونه C_2H_2 بر حسب فاصله در حضور رقیق‌ساز

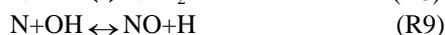
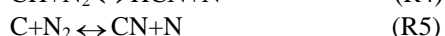


شکل ۱۰- نمودار کسر مولی گونه NO بر حسب فاصله در حضور رقیق‌ساز

افزایش CO_2 ، علاوه بر اینکه از طریق رقیق‌سازی کاهش NO_x را باعث می‌شود، با کاهش دما باعث کاهش تولید NO حرارتی نیز می‌شود، زیرا سرعت تشکیل NO حرارتی کم بوده و در نواحی پس‌شعله تشکیل می‌شود. با کاهش دما، انرژی لازم برای شکست پیوند سه‌گانه N_2 کاهش یافته و NO_x کمتری تولید می‌شود. به سازوکار تولید NO ، از طریق سازوکار حرارتی که در زیر آمده است، توجه کنید.



رقیق‌ساز CO_2 در واکنش شیمیایی با گونه CH از طریق مسیر $CO_2+CH \rightarrow HCO+CO$ باعث کاهش غلظت این گونه شده و با توجه به سازوکار فنیمور (Fenimore)، که در آن CH یک گونه میانی مهم است، باعث کاهش تولید NO_x می‌شود. سازوکار فنیمور به صورت زیر است:



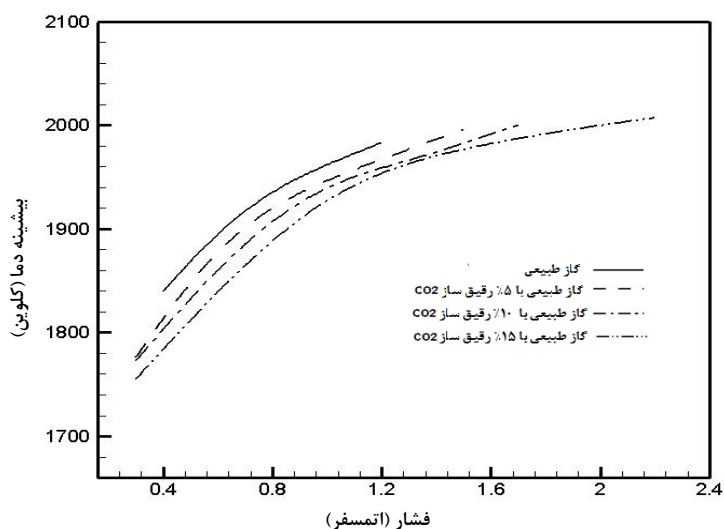
اثر رقیق‌سازی CO_2 بر گونه N_2O ، که با کاهش غلظت این گونه همراه است، نیز باعث کاهش تولید NO_x از طریق این مسیر (مسیر تولید NO از طریق منوکسید دی‌نیتروژن) می‌شود که به شکل زیر است:



کاهش غلظت گونه CH ، که در بالا به آن اشاره شد، همچنین سبب کاهش تولید گونه C_2H_2 ، که به طور عمده از مسیر $CH+CH_2 \rightarrow H+C_2H_2$ تشکیل می‌شود، نیز می‌شود.

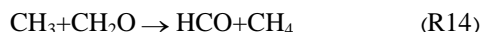
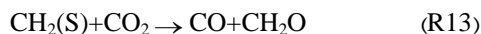
اثر فشار بر دمای بیشینه در حضور رقیق‌ساز CO_2

شکل ۱۱ تاثیر فشار محیط بر بیشینه دما را همراه با رقیق‌سازی بررسی می‌کند و نشان می‌دهد که بیشینه دما، با افزایش فشار، افزایش می‌یابد و نیز مجدداً بر کاهش بیشینه دما در یک فشار خاص بر اثر افزایش درصد رقیق‌ساز تاکید می‌کند.



شکل ۱۱- نمودار بیشینه دما بر حسب فشار در مقادیر مختلف رقیق‌سازی با CO_2

نکته قابل توجه در اینجا این است که اشتعال پذیری با افزایش درصد CO_2 در محدوده بیشتری از فشارهای محیط میسر است و دلیل آن کاهش دمای بیشینه است که احتراق را تا فشارهای بالاتری ممکن می‌سازد. افزایش اشتعال پذیری در حضور CO_2 همچنین از طریق دو واکنش زیر توجیه پذیر است که در آن CO_2 به طور عمد به CH_2O و سپس این گونه به CH_4 ، که گونه اصلی احتراق گاز طبیعی است، تبدیل می‌شود.



نتیجه گیری و جمع بندی

در این تحقیق، مدل سازی شعله جریان مخالف نفوذی برای احتراق گاز طبیعی که ترکیبی از گازهای مختلف است با درصدهای مختلف رقیق سازی با CO_2 انجام شد. شبیه سازی‌ها برای چهار شعله، که مشخصات آن‌ها در جدول ۱ آمده است، اجرا شده است. استفاده از رقیق ساز نقشی مهم در کاهش کسر مولی C_2H_2 ، که یک پیش ماده مهم در تشکیل دوده است و NO که یک آلاینده زیست محیطی به شمار می‌رود، ایفا می‌کند. به علاوه، استفاده از رقیق ساز باعث کاهش دمای شعله بی دررو می‌شود. با افزایش رقیق ساز، غلظت واکنش دهنده‌ها کاهش یافته و بنابراین نرخ واکنش‌ها و در نتیجه نرخ واکنش کلی کاهش می‌یابد که این کاهش نرخ واکنش به کاهش بیشینه دما منجر می‌شود.

به طور کلی اثر افزایش رقیق ساز از دو جهت قابل بررسی است.

۱. اثر رقیق کنندگی: CO_2 اضافه شده غلظت‌های واکنش دهنده‌ها را کاهش می‌دهد. با کاهش غلظت واکنش دهنده‌ها، نرخ واکنش کلی کاهش می‌یابد. این اثر در کاهش بیشینه دما، که در بخش نتایج ارائه شد، نمود پیدا می‌کند.
۲. اثر شیمیایی: CO_2 از نظر کلی یک عنصر خنثی نیست و در دماهای بالا به CO تبدیل می‌شود. واکنش‌های مرتبط با CO قابل چشم پوشی نیست. اثر شیمیایی رقیق ساز در ناحیه واکنش ظاهر می‌شود. این اثر دلیل افزایش حدود اشتعال پذیری به وسیله CO_2 است.

منابع

1. S. P. Burk and T. E. W. Schuman, "Diffusion flames," *Induser. Engng Chem.*, 20, No. 10, 1928, p. 998.
2. K. Wohl, C. Gazley and N. Kapp, "Diffusion flames," *Third Symposium (International) on Combustion*, Williams and Wilkins, Baltimore, 1949, p. 288.
3. H. C. Hottel and W. R. Hawthorne, "Diffusion in Laminar Flame Jets," *Third Symposium (International) on Combustion*, Williams and Wilkins, Baltimore, 1949, p. 254.
4. J. A. Fay, "The Distributions of Concentration and Temperature in a Laminar Jet Diffusion Flame," *J. Aeronaut. Sci.*, 21, 1954, pp. 681-689.
5. J. Suh and A. Atreya, "The Effect of Water Vapor on Coynterflow Diffusion Flames," *Proc. 3rd International Conference on Fire Research and Engineering (ICFRE)*, Orlando, September 10-15, 1995.
6. X. L. Zheng, J. D. Blouch, D. L. Zhu, T. G. Kreutz and C. K. Law, "Ignition of Premixed Hydrogen/Air by Heated Counter Flow," *Proceedings of the Combustion Institute*, 29, 2002, pp. 1637-1643.
7. S. Jahangirian, A. Engeda and I. S. Wichman, "Thermal and Chemical Structure of Biogas Counterflow Diffusion Flames," *Energy Fuels*, 23, 2009, pp. 5312-5321.
8. R. J. Kee, J. A. Miller, G. H. Evans and G. Dixon-Lewis, "A Computational Model of the Structure and Extinction of Strained, Opposed Flow, Premixed Methan-Air Flames," *Twenty Second Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1988, pp. 1479-1494.
9. K. Seshadri and F. A. Williams, "Laminar Flow between Parallel Plates with Injection of a Reactant at High Reynolds Number," *Int. J. Heat Mass Transfer*, 21, 1978, pp. 251-253.
10. A. E. Lutz, R. I. Kee, J. F. Grcar and F. M. Rupley, "OPPDIF: A Fortran Program for Computing Opposed-Flow Diffusion Flames," Sandia National Laboratories Report SAND96-8243, 1997.
11. Y. H. Ho and K. M. Isaac, "Analysis of Opposed Jet Hydrogen-Air Counter Flow Diffusion Flame," Technical Memorandum Mae-TM-25, Prepared Under NASA Langley Research Center Grant NAG-1-861, 1989.
12. G. L. Pellett, G. B. Northam, R. Guerra and L. G. Wilson, "Opposed jet burner studies of Silane-Methane, Silane-Hydrogen, and Hydrogen diffusion flames with air," *Preceding Chemical Propulsion Information Agency (CPIA) Publication 457*, 1, 1986, pp. 391-404.
13. <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>

English Abstract

Numerical Study on Counterflow Diffusion Flames of Natural Gas with CO₂ Dilution

J. Khadem and A. Asadi

Department of Mechanical Engineering, Birjand University

(Received: 2011.7.1, Received in revised form: 2012.2.5, Accepted: 2012.2.26)

Since natural gas has become a very important energy source in most parts of the industrialize world, it is necessary to study the flame structure and the effect of its exhausts on the environment. In this paper, the combustion of natural gas, which is a combination of different hydrocarbons such as CH₄, C₂H₆, and C₃H₈, and gasses like N₂, CO₂, and O₂ and H₂ has been investigated using the counterflow diffusion flame model. In this research, the profiles of temperature, species concentration, and NO_x mixtures are determined using numerical solution and the CO₂ diluent effect on temperature distribution and rate of species production are investigated. GRI3.0 mechanism is selected as the chemical kinetic in modeling natural gas combustion. Increasing the CO₂ diluent in the fuel causes a reduction in the peak combustion temperature, which is caused by decreased concentration of reactants and consequently reduction in the general reaction rate. It also reduces the peak of mole fraction species of C₂H₂ and NO.

Keywords: Diffusion flame, Counterflow, Natural gas combustion, Dilution, Simulation