

مطالعه عددی تاثیر تزریق هیدروژن و بخار آب به منظور کاهش میزان مونوکسید کربن تولیدشده ناشی از تزریق دی اکسید کربن درون اکسیدکننده در احتراق سوخت-اکسیژن

علی اصغری^۱، کیومرث مظاهری^{۲*}، علیرضا علی پور^۳، اسماعیل ابراهیمی فردویی^۴

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، Ali.asghari6990@gmail.com

۲- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، kiumars@modares.ac.ir

۳- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، a.alipoor@scu.ac.ir

۴- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، E.Ebrahimifordoei@modares.ac.ir

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۹۶/۴/۳۱، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۶/۶/۲۲، پذیرش: ۹۶/۶/۲۶)

چکیده: در مقاله حاضر، تزریق بخار آب درون اکسیدکننده و تزریق هیدروژن درون سوخت به منظور کاهش میزان مونوکسید کربن تولیدشده در فرایند احتراق سوخت-اکسیژن همراه با تزریق CO₂ درون اکسیدکننده مطالعه شده است. بدین منظور از شبیه سازی یک بعدی با استفاده از حلگر شعله نفوذی جریان متقابل و شبیه سازی سه بعدی با کمک نرم افزار اپن فوم استفاده شده است. در حل یک بعدی به بررسی تاثیر تزریق بخار آب درون اکسیدکننده و هیدروژن درون سوخت پرداخته شده و تاثیر آن بر میزان شاخص انتشار مونوکسید کربن بررسی شده است. نتایج به دست آمده از این شبیه سازی نشان دهنده آن است که تزریق بخار آب درون اکسیدکننده منجر به کاهش شاخص انتشار مونوکسید کربن در فرایند احتراق سوخت-اکسیژن می شود، در حالی که تزریق هیدروژن درون سوخت منجر به افزایش میزان شاخص انتشار مونوکسید کربن می شود. از این رو، در مطالعه سه بعدی، با توجه به هزینه محاسباتی بسیار بالا در آن، تنها، به بررسی تاثیر تزریق بخار آب درون اکسیدکننده به عنوان راه حلی مناسب جهت کاهش مونوکسید کربن تولیدشده پرداخته شده است. نتایج به دست آمده در شبیه سازی سه بعدی نشان می دهند که تزریق بخار آب در جریان اکسیدکننده باعث کاهش تولید مونوکسید کربن در ناحیه واکنشی و کاهش میزان انتشار مونوکسید کربن از خروجی کوره می شود.

کلیدواژگان: احتراق سوخت-اکسیژن، تزریق بخار آب، تزریق دی اکسید کربن، کاهش تولید مونوکسید کربن

مقدمه

از سال ۱۹۹۰، نگرانی های ایجاد شده پیرامون افزایش سطح انتشار گازهای گلخانه ای و تغییرات شدید آب و هوایی سبب شد تا تکنولوژی احتراق سوخت-اکسیژن مورد توجه قرار گرفته و تحقیقات بر روی این احتراق جهت استفاده در کاربردهای مختلف صنعتی آغاز شود [۱]. با توجه به استفاده از اکسیژن خالص در این فرایند احتراقی، دما به میزان قابل توجهی افزایش می یابد که این موضوع چالش های عمده ای از قبیل نیاز به تغییرات اساسی در کوره های سوخت-هوای فعلی و همچنین عدم استفاده از این احتراق در تمامی کاربردها را به دنبال دارد. از این رو و به منظور برطرف کردن این چالش ها، در فرایند احتراق سوخت-اکسیژن، از بازچرخش محصولات حاصل از این احتراق، که به صورت عمده شامل دی اکسید کربن و بخار آب می شوند، استفاده شده است [۱]. در سال های اخیر مطالعات گسترده ای در زمینه احتراق سوخت-اکسیژن انجام شده است. بین و همکارانش [۲]، در سال ۲۰۱۱، به مطالعه نقش سینتیک و تابش در احتراق سوخت-اکسیژن با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی در دو محفظه احتراق با

ظرفیت متفاوت ۰/۸ و ۶۰۹ مگاوات همراه با بازچرخش گازهای حاصل از احتراق و سوخت گاز طبیعی پرداختند. نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی‌های انجام شده توسط آن‌ها بیانگر این است که عدم در نظر گرفتن واکنش‌های تجزیه‌ای در احتراق سوخت-اکسیژن منجر به ایجاد خطای بسیار زیادی می‌شود. اهمیت این واکنش‌ها به اندازه‌ای است که در نظر گرفتن آن‌ها در سینتیک چهار مرحله‌ای اصلاح شده جونز-لیندستد^۱ اصلاح شده نسبت به سینتیک دومرحله‌ای وستبروک-درایر^۲ اصلاح شده منجر به پیش‌بینی بیشینه دما تا حدود ۱۰۰۰ کلوین می‌شود. علاوه بر این، بررسی آن‌ها نشان می‌دهد که غلظت بالای دی‌اکسید کربن، به علت بازچرخش گازهای حاصل از احتراق، منجر به افزایش تولید مونوکسید کربن در ناحیه نزدیک مشعل می‌شود که علت آن واکنش دی‌اکسید کربن با رادیکال‌های هیدروکربنی و اتم هیدروژن است. گالتی و همکارانش [۳]، در سال ۲۰۱۳، به شبیه‌سازی عددی احتراق متان-اکسیژن در یک کوره آزمایشگاهی نیمه‌صنعتی با توان ۳ مگاوات مجهز به مشعل با ناکس کم پرداختند. در این مطالعه، با استفاده از مدل‌های احتراقی EDC^۳ و EDM^۴، از بازچرخش محصولات احتراقی، به منظور کاهش بیشینه دما در محفظه احتراق، استفاده شده است. نتایج حاصل از این بررسی نیز نشان می‌دهد که اندرکنش بین شیمی و اغتشاش نقش مهمی در تعیین دما و غلظت گونه‌ها داشته و مدل احتراقی EDC پیش‌بینی بهتری از دما و غلظت گونه‌ها ارائه می‌دهد. اندرسن و همکارانش [۴]، در سال ۲۰۰۹، با مطالعه آزمایشگاهی کوره مجهز به احتراق اکسیژن-پروپان با توان ۱۰۰ کیلووات، نتیجه گرفتند که غلظت مونوکسید کربن در ناحیه نزدیک مشعل افزایش می‌یابد و سطح مونوکسید کربن در احتراق سوخت-اکسیژن نسبت به احتراق متداول هوا-سوخت در دمای یکسان بیشتر است. با توجه به بررسی‌های انجام شده، استفاده از بازچرخش محصولات احتراقی، به منظور کاهش بیشینه دما و ایجاد توزیع دمایی یکنواخت‌تر، منجر به افزایش تولید مونوکسید کربن می‌شود که این موضوع نیز مشکلات زیادی را در پی خواهد داشت.

در سال‌های اخیر، به‌عنوان راه‌حلی دیگر جهت برطرف کردن مشکلات بیان شده در ارتباط با احتراق سوخت-اکسیژن، استفاده از تزریق CO₂، که به‌سادگی و از طریق فرایند چگالش از بخار آب موجود در محصولات احتراقی قابل جداسازی است، پیشنهاد شده است. تاثیر تزریق دی‌اکسید کربن در مقایسه با احتراق سوخت-هوا به دو صورت فیزیکی و شیمیایی است. تاثیر فیزیکی تزریق به علت متفاوت بودن ظرفیت حرارتی ویژه و خصوصیات تشعشی گاز دی‌اکسید کربن با گاز نیتروژن است. بالاتر بودن ظرفیت حرارتی ویژه و انتقال حرارت تشعشی گاز دی‌اکسید کربن نسبت به گاز نیتروژن سبب کاهش دمای شعله و توزیع یکنواخت‌تر حرارت درون کوره می‌شود. از طرف دیگر، تاثیر شیمیایی تزریق دی‌اکسید کربن به محفظه‌ی احتراق به علت شرکت مستقیم دی‌اکسید کربن در واکنش‌های احتراقی با توجه به دمای بالای فرایند احتراق است. گلاربرگ و بنتزن [۵]، در سال ۲۰۰۷، به شبیه‌سازی یک‌بعدی تاثیر تزریق دی‌اکسید کربن درون اکسیدکننده در احتراق سوخت-اکسیژن با استفاده از نرم‌افزار کمکین پرداختند. در این مطالعه، از سینتیک کامل برای انجام بررسی‌ها استفاده شده است. نتایج به دست آمده نشان‌دهنده آن است که در احتراق سوخت-اکسیژن غلظت مونوکسید کربن در ناحیه نزدیک شعله به شدت افزایش می‌یابد. آن‌ها با مقایسه میزان انتشار مونوکسید کربن با افزایش دما نتیجه گرفتند در حضور دی‌اکسید کربن غلظت مونوکسید کربن با دما افزایش می‌یابد. تاثیر شیمیایی تزریق دی‌اکسید کربن در تشکیل مونوکسید کربن از طریق تحلیل ترمودینامیکی و شبیه‌سازی یک‌بعدی شعله نفوذی جریان متقابل با استفاده از سینتیک کامل به‌وسیله تزریق چن و همکارانش [۶] در سال ۲۰۱۴ انجام گرفت. نتایج حاصل از شبیه‌سازی یک‌بعدی نشان می‌دهد که واکنش دی‌اکسید کربن با رادیکال هیدروژن عامل اصلی شکل‌گیری مونوکسید کربن است. آن‌ها، با مقایسه میزان انتشار مونوکسید کربن در احتراق سوخت-اکسیژن با سوخت-هوا، نتیجه گرفتند که کسر مولی مونوکسید کربن تابعی از دما و نسبت استوکیومتری است.

1. Jones and Lindstedt
2. Westbrook and Dryer
3. Eddy Dissipation Concept
4. Eddy Dissipation Model

علاوه بر مطالعات عددی صورت گرفته بر روی اثرات تزریق دی اکسید کربن بر احتراق سوخت-اکسیژن، مطالعات تجربی مختلفی نیز در ارتباط با این موضوع صورت گرفته و در این مطالعات اثر پارامترهای مختلف بر شرایط عملکردی مطالعه شده است. آماتو و همکارانش [۷]، در سال ۲۰۱۰، به مطالعه و مدل سازی تاثیر تزریق دی اکسید کربن بر روی انتشار اکسیژن و مونوکسید کربن به صورت آزمایشگاهی و عددی در احتراق سوخت-اکسیژن پرداختند. آن ها از این مطالعه نتیجه گرفتند که انتشار مونوکسید کربن وابستگی شدیدی به نسبت استوکیومتری، غلظت دی اکسید کربن و زمان سکونت و دمای شعله دارد. علاوه بر این، آن ها مشاهده کردند که انتشار مونوکسید کربن با افزایش دمای شعله افزایش می یابد. در مطالعه دیگری، که توسط آماتو و همکارانش [۸] در سال ۲۰۱۱ انجام شد، مطالعه آزمایشگاهی و عددی اثر رقیق سازی دی اکسید کربن در انتشار اکسیژن و مونوکسید کربن بررسی شد. اهمیت این مطالعه از این جهت بود که حضور اکسیژن و مونوکسید کربن در گازهای خروجی نشان دهنده هدر رفتن سوخت و اکسید کننده و افزایش هزینه ها به علت هزینه بالای تولید اکسیژن است. همچنین، افزایش غلظت آن ها در گازهای خروجی مانع جذب و ذخیره سازی مستقیم دی اکسید کربن در اعماق زمین می شود. آن ها نتیجه گرفتند که افزایش نسبت استوکیومتری و دمای شعله موجب افزایش انتشار مونوکسید کربن می شود. همچنین، غلظت مونوکسید کربن در مخلوط احتراقی فقیر پایین تر است و با افزایش نسبت هم آروزی افزایش می یابد. در شرایط احتراق هوا-سوخت، انتشار مونوکسید کربن مستقل از نسبت استوکیومتری است و همیشه از احتراق سوخت-اکسیژن (O_2/CO) کمتر است.

با توجه به مطالب بیان شده، اصلی ترین چالش ایجاد شده در اثر تزریق دی اکسید کربن در احتراق سوخت-اکسیژن افزایش انتشار مونوکسید کربن است. افزایش انتشار غلظت مونوکسید کربن در خروجی به معنای هدر رفتن سوخت است که این موضوع موجب کاهش بازده احتراق و در نتیجه موجب افزایش میزان مصرف سوخت به ازای تولید توان یکسان می شود. علاوه بر این، غلظت بالای مونوکسید کربن به صورت محلی ممکن است منجر به خوردگی محفظه احتراق شود. از این رو، استفاده از روش هایی که منجر به کاهش تولید مونوکسید کربن در ناحیه تشکیل شعله شود، در حالی که بر روی فرایند احتراق تاثیر زیادی نگذارد، از اهمیت بسیار بالایی برخوردار است. در مطالعه حاضر، تزریق هیدروژن درون سوخت و تزریق بخار آب درون اکسید کننده به عنوان راه کارهایی جهت کاهش مونوکسید کربن تولید شده در ناحیه شعله پیشنهاد شده است. ابتدا، به شبیه سازی یک بعدی اثرات تزریق با استفاده از حلگر شعله نفوذی جریان متقابل پرداخته شده است. این کار با توجه به هزینه بالای محاسباتی انجام شبیه سازی های سه بعدی و همچنین امکان مطالعه اثرات شیمیایی تزریق بخار آب و هیدروژن با استفاده از سینتیک کامل انجام شده است. سپس، با توجه به نتایج به دست آمده از شبیه سازی یک بعدی، شبیه سازی سه بعدی تزریق مقادیر مختلف بخار آب، با توجه به تاثیر قابل توجه آن در کاهش میزان مونوکسید کربن تولیدی در ناحیه شعله، مطالعه شده است. با توجه به اینکه در حل یک بعدی جریان آرام مورد شبیه سازی قرار می گیرد و اثرات آشفتگی جریان را نمی توان دید، حل سه بعدی با استفاده از سینتیک شیمیایی کاهیده شده، اما مناسب، جهت پیش بینی مونوکسید کربن در احتراق سوخت-اکسیژن همراه با تزریق دی اکسید کربن، می تواند اثرات آشفتگی و برهم کنش میان آشفتگی و احتراق را بر حلی منطبق با شرایط واقعی به خوبی نشان دهد.

مطالعه یک بعدی اثرات تزریق بخار آب و هیدروژن

به منظور مطالعه اثر تزریق بخار آب در جریان اکسید کننده، تزریق هیدروژن در جریان سوخت و همچنین تزریق دی اکسید کربن درون اکسید کننده بر میزان تولید مونوکسید کربن، از شبیه سازی یک بعدی (حلگر شعله نفوذی جریان متقابل) استفاده شده است. با توجه به امکان استفاده از سینتیک های کامل، مانند GRI3.0، در این حلگر اثرات شیمیایی ناشی از تزریق نیز مورد بحث و بررسی قرار خواهد گرفت. بدین منظور، با استفاده از نرم افزار کمکین به حل مسئله شعله نفوذی بین دو نازل، که هر یک از ورودی های سوخت و اکسید کننده در آن کاملاً مجزا بوده و در مقابل یکدیگر قرار دارند، پرداخته می شود. در این هندسه، از دو نازل دایروی هم مرکز، که در مقابل یکدیگر قرار دارند، مطابق شکل ۱، استفاده می شود [۹].

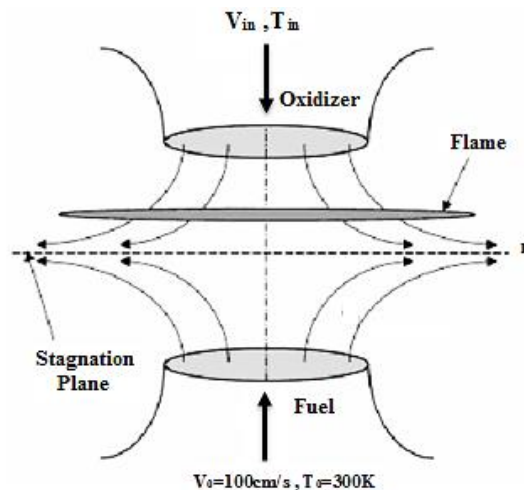


Figure 1- Stagnation plane and boundary conditions for counter flow diffusion flame

شکل ۱- صفحه سکون و شرایط مرزی برای شعله نفوذی جریان متقابل

این هندسه منجر به ایجاد یک صفحه سکون بین دو نازل سوخت و اکسیدکننده می شود که محل آن با توجه به شرایط مرزی سوخت و اکسیدکننده تعیین می شود. شرایط مرزی حاکم بر مسئله در شکل ۱ نشان داده شده است. سرعت و دمای جریان سوخت، که در بررسی حاضر متان یا مخلوط متان و هیدروژن (در حالت تزریق CO_2 و H_2O درون اکسیدکننده، سوخت متان و در حالت تزریق هیدروژن درون سوخت، مخلوطی از متان و هیدروژن) است، ثابت و به ترتیب برابر با 100 cm/s و 300 K در نظر گرفته شده است. دمای اکسیدکننده، که مخلوطی با کسر مولی های متفاوت از O_2 و CO_2 یا O_2 و CO_2 و H_2O است، نیز ثابت و برابر با 380 K انتخاب شده تا از تزریق H_2O به صورت بخار اطمینان حاصل شده باشد. علاوه بر این، سرعت مخلوط اکسیدکننده به گونه ای محاسبه شده تا صفحه سکون در ناحیه میانی دو جریان قرار گیرد تا در شرایط متفاوت حاکم بر مسئله محل تشکیل این صفحه تغییر نکند (این کار با برابر قراردادن تکانه در جریان سوخت و اکسیدکننده انجام شده است). سینتیک GRI3.0 شامل ۵۳ گونه و ۳۲۵ واکنش، برای شبیه سازی ها، استفاده شده است [۱۰].

معادلات حاکم

در این بخش، به بیان معادلات حاکم بر حلگر شعله نفوذی جریان متقابل (OPPDIF)^۱، که در آن جریان سوخت و اکسیدکننده از ورودی های کاملاً مجزا و مقابل یکدیگر وارد می شوند، پرداخته می شود. در این حالت، با استفاده از انتقال تشابهی، میدان جریان متقارن محوری قابل حل است. حل تشابهی میدان حل را در هندسه متقارن محوری و نیز در هندسه دوبعدی صفحه ای به یک مسئله یک بعدی کاهش می دهد. در این حالت، حل تشابهی فرض می کند که مولفه شعاعی سرعت خطی بوده و سایر متغیرهای وابسته جریان تنها تابعی از جهت محوری اند. در حل یک بعدی، معادلات پیوستگی، تکانه، انرژی و بقای گونه در جریان آرام برای حالت پایا حل می شوند.

اعتبارسنجی حلگر یک بعدی

به منظور اعتبارسنجی حلگر مورد استفاده از نتایج آزمایشگاهی مربوط به مطالعه لیم و همکارانش [۱۱] در سال ۲۰۰۰، که مربوط به احتراق متان در شرایط سوخت-هواست، استفاده شده است. بدین منظور، با توجه به کار تجربی انجام شده، فاصله نازل های سوخت و هوا برابر با $1/2$ سانتی متر در نظر گرفته شده است. سرعت جریان سوخت برای اعتبارسنجی مطابق با کار تجربی برابر

1. Opposed-flow diffusion flames

با ۷۰ سانتی متر بر ثانیه و در سایر بررسی‌های صورت گرفته برابر با ۱۰۰ سانتی متر بر ثانیه است. برای گسسته‌سازی عبارت‌های جابه‌جایی و نفوذ از روش اختلاف مرکزی^۱ استفاده شده است. استفاده از این روش منجر به جلوگیری از ایجاد نفوذ عددی در حل شده و دقت بالاتری نسبت به روش گسسته‌سازی آپویند^۲ فراهم می‌آورد.

شکل ۲ مقایسه میان توزیع گونه‌های دی‌اکسیدکربن، هیدروژن و مونوکسیدکربن در میدان حل را نشان می‌دهد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، نتایج به دست آمده از حلگر شعله نفوذی جریان متقابل تطابق بسیار خوبی با داده‌های تجربی داشته که این موضوع بیانگر معتبربودن شرایط در نظر گرفته شده برای حلگر مورد استفاده است.

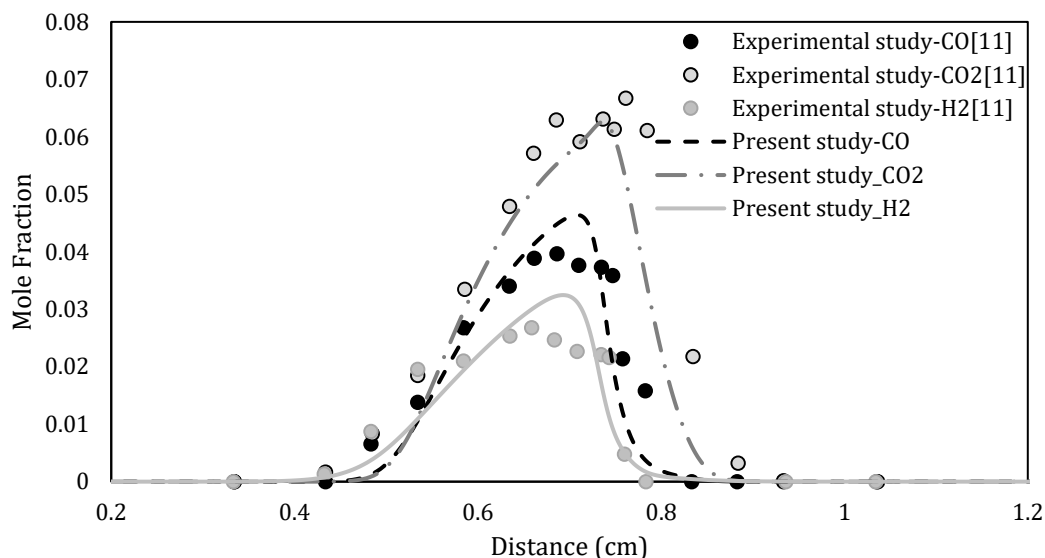


Figure 2- Validation of solver with reference experimental data [11] (lines representing data obtained from numerical simulation and symbols represent experimental data)

شکل ۲- اعتبارسنجی حلگر با داده‌های تجربی مرجع [۱۱] (خطوط نشان‌دهنده داده‌های به دست آمده از شبیه‌سازی عددی و علائم بیانگر داده‌های تجربی‌اند)

نتایج حاصل از تزریق مقادیر مختلف CO₂ درون اکسیدکننده

ابتدا، در شبیه‌سازی یک‌بعدی، به بررسی تاثیر تزریق مقادیر مختلف CO₂ درون اکسیدکننده بر توزیع دما و مشخصه انتشار آلاینده مونوکسید کربن پرداخته می‌شود و نتایج به دست آمده با احتراق سوخت-اکسیژن بدون تزریق CO₂ مقایسه می‌شود. بدین منظور از تزریق جرمی مقادیر ۲۵، ۵۰ و ۷۰ درصدی CO₂ به جای O₂ درون اکسیدکننده استفاده شده است. در بررسی‌ها از شاخص انتشار مونوکسیدکربن (EICO)^۳، که بیانگر میزان مونوکسید کربن تولیدشده بر کیلوگرم سوخت مصرفی است، استفاده شده است. مقدار شاخص انتشار مونوکسیدکربن از رابطه (۱) محاسبه می‌شود [۹]:

$$EI_{CO}(x) = \frac{\int_0^x \dot{w}_{CO}(l) W_{CO} dl}{-\int_0^x \dot{w}_{fuel}(l) W_{fuel} dl} \times 1000 \left[\frac{gCO}{kgfuel} \right] \quad (1)$$

۱. Central difference

۲. Upwind

3. Emission Indices Carbon monoxide

شکل های ۳-الف و ۳-ب به ترتیب نتایج مربوط به توزیع دما و شاخص انتشار مونوکسید کربن را نشان می دهد. همان طور که مشاهده می شود، با تزریق CO_2 درون اکسیدکننده و همچنین افزایش کسر جرمی آن از بیشینه و متوسط دمایی احتراق کاسته می شود که این موضوع به علت کاهش شدت واکنش ها در نتیجه کاهش غلظت اکسیژن جهت شرکت در واکنش ها و همچنین ظرفیت حرارتی بالای CO_2 است که منجر به جذب مقادیر قابل توجهی از حرارت آزاد شده در فرایند احتراق می شود. با توجه به شکل ۳-ب، تزریق CO_2 درون اکسیدکننده منجر به افزایش شاخص انتشار مونوکسید کربن می شود. علاوه بر این، همان طور که در شکل های ۳-الف و ۳-ب دیده می شود، تزریق CO_2 منجر به انتقال بیشینه دما و شاخص انتشار مونوکسید کربن به سمت ورودی اکسیدکننده می شود. در واقع، تزریق CO_2 درون اکسیدکننده منجر به کاهش سرعت سوزش به علت کاهش غلظت O_2 و کاهش واکنش های اولیه در تولید رادیکال ها می شود که باعث کاهش تجزیه سوخت می شود. این موضوع باعث می شود که جبهه شعله به سمت جریان اکسیدکننده حرکت کند تا کاهش میزان رادیکال های آزاد را جبران کند.

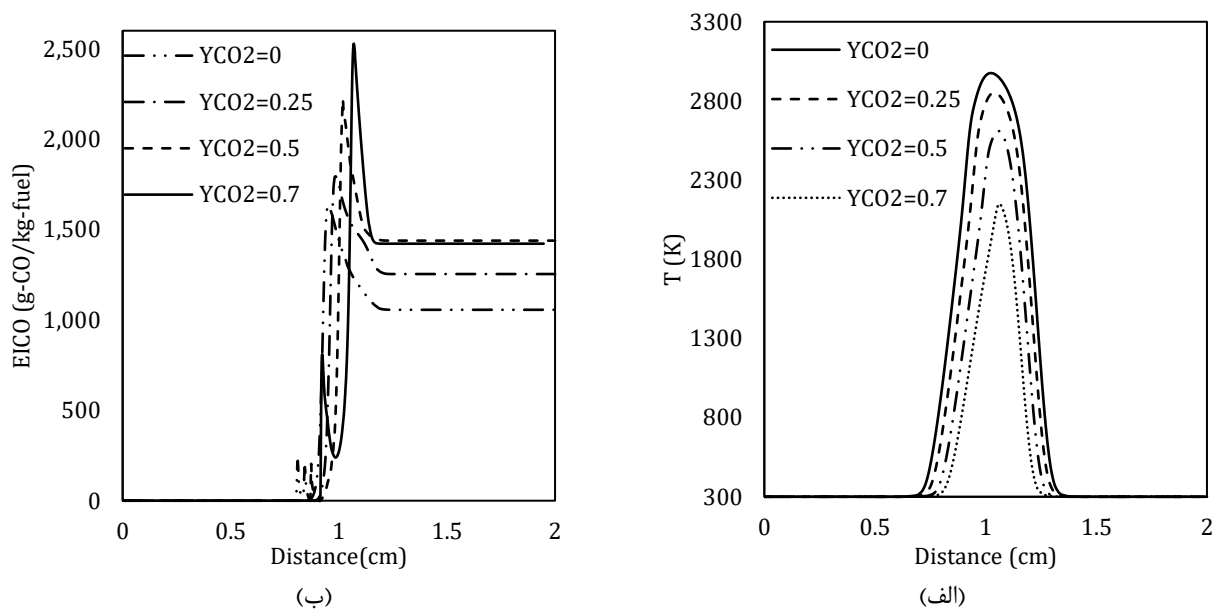


Figure 3- The effect of different CO_2 injection values between fuel and oxidizer nozzles on a) The temperature distribution b) The carbon monoxide emission index

شکل ۳- تاثیر تزریق مقادیر مختلف CO_2 در صفحه بین نازل سوخت و اکسیدکننده: الف) بر روی توزیع دما، ب) بر روی شاخص انتشار مونوکسید کربن

نتایج حاصل از تزریق مقادیر مختلف بخار آب درون اکسیدکننده

یکی از روش های مورد بررسی در مقاله حاضر، به منظور کاهش مونوکسید کربن، استفاده از تزریق بخار آب درون اکسیدکننده است. جایگزینی مقادیر مختلفی از CO_2 با بخار آب در این قسمت مطالعه شده و تاثیر آن بر روی توزیع دما و شاخص انتشار آلاینده مونوکسید کربن مطالعه شده است. در شکل های ۴-الف و ۴-ب، به ترتیب، اثر جایگزینی دی اکسید کربن با بخار آب درون اکسیدکننده بر روی توزیع دما و شاخص انتشار مونوکسید کربن نشان داده شده است. با توجه به نتایج به دست آمده، می توان مشاهده کرد که جایگزینی بخشی از H_2O با CO_2 منجر به افت دمای بیشتر در ناحیه واکنشی می شود که این موضوع به علت بیشتر بودن ظرفیت حرارتی H_2O نسبت به CO_2 است.

علت کاهش شاخص انتشار مونوکسید کربن با تزریق $H_2O(g)$ این است که تزریق $H_2O(g)$ موجب افزایش تولید رادیکال OH از طریق واکنش با رادیکال O طبق واکنش (۱) می شود. افزایش درصد تزریق $H_2O(g)$ موجب افزایش رادیکال OH می شود.

ژینگ لی و همکارانش [۱۲] با مطالعه شعله نفوذی غیرپیش آمیخته متان-اکسیژن به همراه تزریق CO_2 و $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ نتیجه گرفتند که نرخ تولید رادیکال OH با واکنش (۱) قابل مقایسه با واکنش شاخه‌ای اصلی (۲)، در حالتی که $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ به اکسیدکننده اضافه می‌شود، است.

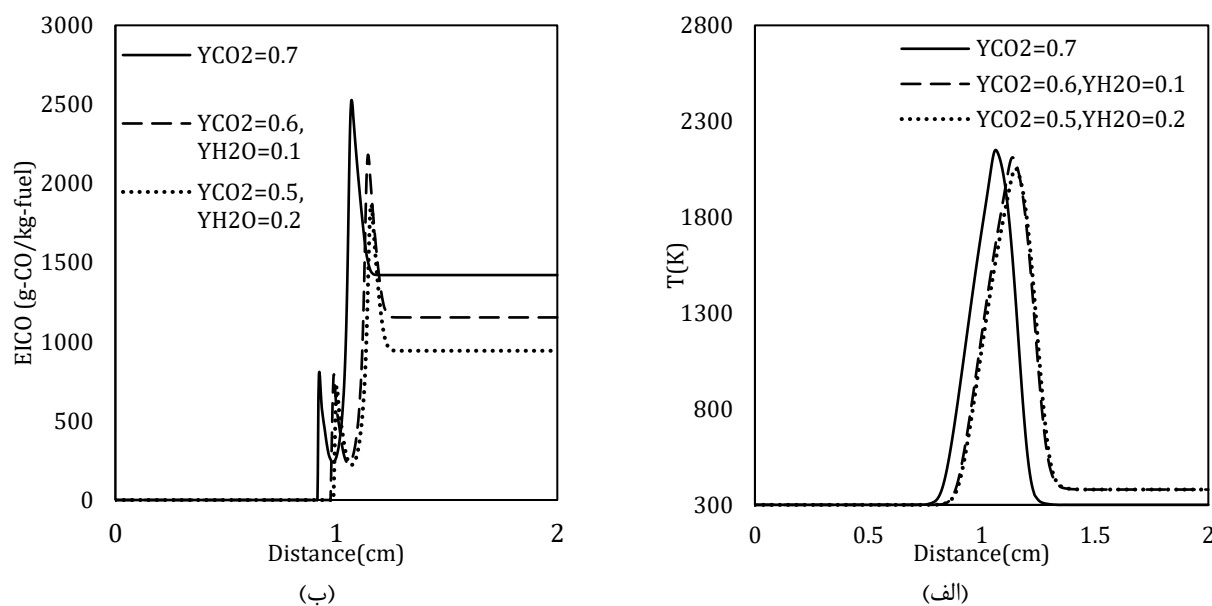
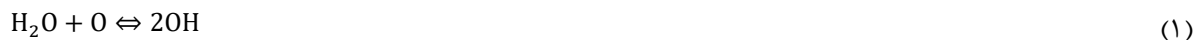


Figure 4- The effect of different amounts injection of water steam in oxidizer flow between fuel and oxidizer nozzles on a) The temperature distribution b) The carbon monoxide emission index

شکل ۴- تاثیر تزریق مقادیر مختلف بخار آب در جریان اکسیدکننده بین نازل سوخت و اکسیدکننده بر الف) توزیع دما، ب) شاخص انتشار مونوکسیدکربن

نتایج حاصل از تزریق مقادیر مختلف هیدروژن درون جریان سوخت

در این بخش، به بررسی اثر تزریق هیدروژن در جریان سوخت بر روی توزیع دما و شاخص انتشار مونوکسیدکربن می‌پردازیم. هیدروژن یک سوخت پاک و بدون کربن محسوب می‌شود. جایگزین کردن سوخت هیدروژن با سوخت‌های هیدروکربنی در احتراق به‌عنوان یکی از روش‌های کاهش انتشار گاز دی‌اکسیدکربن و در نتیجه کاهش مونوکسیدکربن شناخته می‌شود.

همان‌طور که در شکل ۵-الف نشان داده شده است، با تزریق هیدروژن به جریان سوخت دمای شعله افزایش می‌یابد. علت افزایش دما بالا بودن ارزش حرارتی هیدروژن نسبت به سوخت متان است. همچنین، در این شکل مشاهده می‌شود که با افزایش درصد کسر جرمی هیدروژن در جریان سوخت مکان بیشینه دما به سمت ورودی سوخت حرکت می‌کند. علت این موضوع این است که استفاده از هیدروژن به‌جای متان باعث افزایش نرخ سوزش شعله و در نتیجه حرکت جبهه به سمت ورودی سوخت می‌شود. در شکل ۵-ب، تاثیر تزریق هیدروژن در جریان سوخت بر روی شاخص انتشار مونوکسیدکربن در احتراق سوخت-اکسیژن نشان داده شده است با توجه به شکل، جایگزینی بخشی از سوخت متان با سوخت هیدروژن موجب افزایش شاخص انتشار مونوکسیدکربن شده است. علت این موضوع افزایش دما در نتیجه تزریق هیدروژن به جریان سوخت است که موجب افزایش واکنش‌های تجزیه دی‌اکسیدکربن و افزایش تولید مونوکسیدکربن می‌شود. بنابراین، از جایگزینی بخشی از متان با

هیدروژن در جریان سوخت می توان نتیجه گرفت که اثر واکنش های تجزیه دی اکسید کربن، که باعث افزایش تولید مونوکسید کربن می شود، از اثر کاهش مقدار کربن در سوخت، که باعث کاهش تولید مونوکسید کربن می شود، بیشتر است.

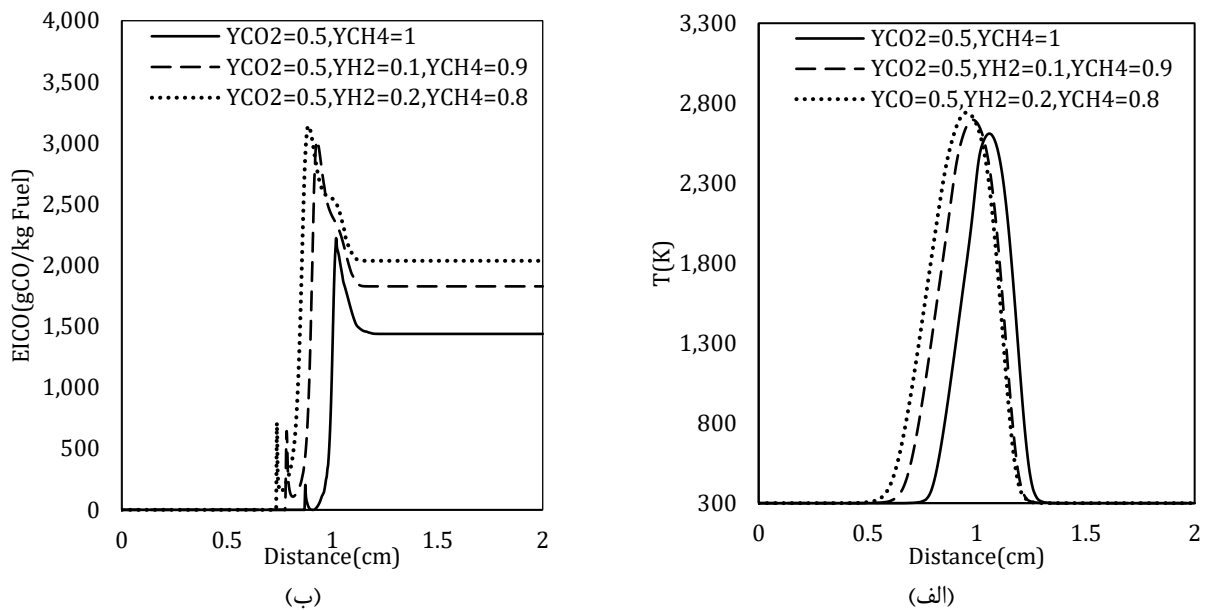


Figure 5- The effect of different amounts injection of Hydrogen in fuel flow between fuel and oxidizer nozzles on a) The temperature distribution b) The carbon monoxide emission index

شکل ۵- تاثیر تزریق مقادیر مختلف هیدروژن در جریان سوخت بر روی توزیع دما بین نازل سوخت و اکسیدکننده بر الف) توزیع دما، ب) شاخص انتشار مونوکسید کربن

همانطور که نتایج حل یک بعدی نشان می دهد، تزریق بخار آب درون جریان اکسیدکننده موجب کاهش دما و شاخص انتشار مونوکسید کربن و تزریق هیدروژن در جریان سوخت باعث افزایش دما و افزایش شاخص انتشار مونوکسید کربن می شود. با توجه به اینکه هدف از تزریق هیدروژن و بخار آب در این مطالعه کاهش دما و کاهش تولید مونوکسید کربن ناشی از تجزیه دی اکسید کربن است، در حل سه بعدی، تنها تاثیر تزریق بخار آب در جریان اکسیدکننده بر روی توزیع دما و تولید مونوکسید کربن بررسی خواهد شد.

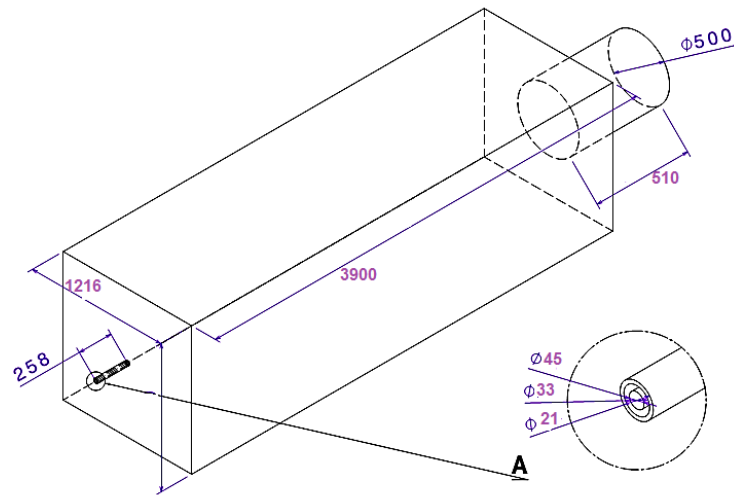
هندسه سه بعدی

کوره احتراقی سوخت-اکسیژن^۱IFRF در پروژه ای با نام OXYFLAM1، به منظور تهیه داده های جامعی از احتراق گاز طبیعی با اکسیژن، توسط لالمنت [۱۳]، مورد آزمون قرار گرفته و داده های تجربی آن تحت دو گزارش بسیار جامع منتشر شد. اهداف اصلی برای انجام این پروژه وجود داده های تجربی گسترده به منظور انجام شبیه سازی های عددی، بهینه سازی انتقال حرارت و انتشار آلاینده ناکس در فرآیند احتراق گاز طبیعی عنوان شده است. کوره سوخت-اکسیژن مورد نظر توان حرارتی یک مگاوات داشته که دیواره آن از طریق خنک سازی با آب در دمای مشخصی نگه داشته شده است.

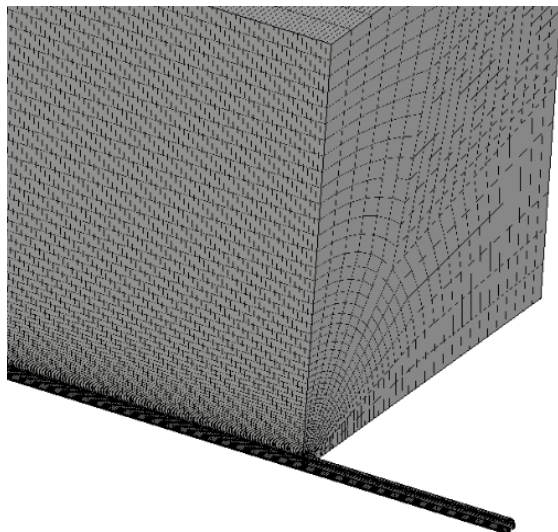
همان طور که در شکل ۶-الف نشان داده شده است، هندسه این کوره شامل یک مکعب با سطح مقطع مربعی است که دارای یک نازل غیر چرخشی برای ورود سوخت و اکسیژن به درون کوره است. در شکل ۶-الف ابعاد کوره و مشعل و در شکل ۶-ب شرایط مرزی حاکم بر کوره و مشعل نشان داده شده است. برای انجام شبیه سازی ها، با توجه به تقارن هندسی و تقارن فیزیکی،

۱. International Flame Research Foundation

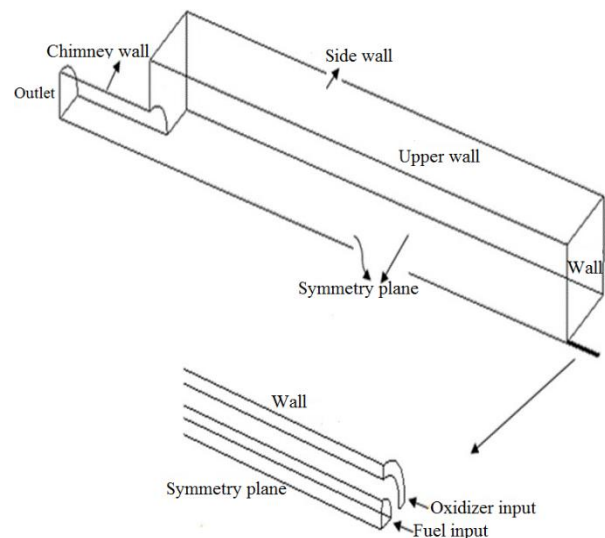
که با تقریب بسیار خوبی می توان آن را در نتایج حاصل از داده های تجربی نیز مشاهده کرد، یک چهارم کوره جهت انجام بررسی ها در نظر گرفته شده است. این کار به منظور کاهش حجم محاسبات عددی صورت گرفته است. همان طور که در شکل ۶-ج مشاهده می شود، از شبکه بندی منظم و ساختاریافته غیریکنواخت در بررسی ها استفاده شده است. غیریکنواختی شبکه به نحوی ایجاد شده است که در قسمت های با گرادین های بالاتر و در مجاورت قسمت هایی که تغییر سطح مقطع مشاهده می شود از شبکه بندی ریزتری استفاده شده است.



(الف)



(ج)



(ب)

Figure 6- a)Methane-oxygen combustion furnace (IFRF)[13] b) Boundary conditions and numerical solution domain [13] c) Created grid on studying furnace[13]

شکل ۶- الف) طرحواره کوره احتراق متان-اکسیژن (IFRF) [۱۳]، ب) شرایط مرزی و محدوده حل عددی [۱۳]، ج) شبکه بندی ایجاد شده بر روی کوره در حال مطالعه [۱۳]

در کوره سوخت-اکسیژن مورد بررسی از گاز طبیعی و اکسیژن به عنوان سوخت و اکسیدکننده به ترتیب استفاده شده است. آنالیز گاز طبیعی و اکسیژن ورودی در بررسی تجربی، ساختار سوخت و اکسیدکننده را به ترتیب مطابق با جدول ۱ و ۲ نشان

می‌دهد. همان‌طور که جدول ۱ مشاهده می‌شود، گاز طبیعی استفاده‌شده در مطالعه تجربی دارای درصدهای مختلفی از هیدروکربن‌هاست که قسمت عمده آن را متان (حدود ۸۹ درصد از مجموع ۹۶ درصد هیدروکربن موجود در گاز طبیعی استفاده‌شده) تشکیل می‌دهد. همچنین ۴ درصد گاز مورد استفاده نیز به نیتروژن، دی‌اکسید کربن و اکسیژن اختصاص دارد. در مطالعه حاضر، از سینتیک چهارمرحله‌ای برای انجام شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است که در این سینتیک‌ها تنها شاهد هیدروکربن متان هستیم. از این رو، در شبیه‌سازی‌ها سهم سایر هیدروکربن‌ها، که حدود ۷ درصد است، به متان اختصاص داده شده است. همچنین، با توجه به اینکه بیش از ۹۹/۵ درصد از اکسیدکننده را اکسیژن تشکیل می‌دهد (جدول ۲)، از اکسیژن خالص به‌عنوان اکسیدکننده استفاده شده است.

جدول ۱- درصد مولی گونه‌های مختلف سوخت [۱۳]

Table 1- Mole percent fuels various species [13]

| Species | CH ₄ | C ₂ H ₆ | C ₃ H ₈ | C ₄ H ₁₀ | CO ₂ | N ₂ | O ₂ |
|---------------|-----------------|-------------------------------|-------------------------------|--------------------------------|-----------------|----------------|----------------|
| Mole fraction | 88.7 | 4.6 | 0.94 | 0.32 | 0.09 | 3.79 | 0.02 |

جدول ۲- درصد مولی گونه‌های مختلف اکسیدکننده [۱۳]

Table 2- Mole percent oxidizer various species [13]

| Species | O ₂ | N ₂ | H ₂ O | CO ₂ | CnHm |
|---------------|----------------|-------------------|------------------|-----------------|------------------|
| Mole fraction | 99.5 | Less than 100 ppm | Less than 10 ppm | Less than 5 ppm | Less than 20 ppm |

شرایط مختلف حاکم بر ورودی‌های سوخت و اکسیدکننده شامل دبی‌های جریان، سرعت، دما و فشار هر یک از این جریان‌ها در جدول ۳ آورده شده است. سایر شرایط مرزی در شکل ۶-ب نشان داده شده است. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود، هندسه مورد بررسی دارای دو صفحه با شرط مرزی متقارن است که برای اعمال آن گرادیان تمامی متغیرها برابر با صفر در نظر گرفته شده است. دمای دیواره کوره با استفاده از لوله‌های آب ۷۰۳ کلین ثابت نگه داشته شده است. برای دیواره ابتدایی و انتهایی کوره، که به ترتیب در مجاورت نازل‌های ورودی سوخت و هوا و همچنین دودکش هستند، از شرط مرزی دیواره عایق مطابق با شرایط تجربی استفاده شده است. برای دیواره جانبی دودکش نیز از شرط مرزی عایق استفاده شده است. شرط مرزی در نظر گرفته شده برای خروجی فشار ثابت و گرادیان سرعت صفر است. شایان ذکر است که برای تمامی دیواره‌ها شرط مرزی سرعت به‌صورت شرط عدم لغزش در نظر گرفته شده است. معادلات حاکم شامل معادله بقای جرم، معادلات بقای تکانه، معادله بقای انرژی و معادلات بقای گونه‌هاست.

جدول ۳- شرایط مرزی حاکم ورودی‌های سوخت و اکسیدکننده در مطالعه حاضر [۱۳]

Table 3- Boundary conditions of fuel and oxidant inputs in the present study [13]

| Flow type | Variable | Variable value |
|-----------|----------------|----------------|
| Oxidizer | Input velocity | 82.93 m/s |
| | Temperature | 298.15 K |
| | pressure | 101369.2 Pa |
| Fuel | Input velocity | 75.37 m/s |
| | Temperature | 298.15 K |
| | pressure | 101369.2 Pa |

در شکل ۷-الف، مقاطع مختلف شعاعی، به‌منظور اعتبارسنجی و بررسی نتایج به‌دست‌آمده، نشان داده شده است. از شبکه‌هایی با ۵۰۰۰۰، ۹۲۰۰۰ و ۱۸۰۰۰۰ سلول به‌منظور بررسی استقلال نتایج به‌دست‌آمده از شبکه عددی استفاده شده

است. مطابق با نتایج به دست آمده برای توزیع دما، که در شکل ۷-ب نشان داده شده است، شبکه عددی با ۹۲۰۰۰۰ سلول تطابق بسیار خوبی با شبکه ۱۸۰۰۰۰۰ سلولی داشته و از این رو در ادامه حل از آن برای بررسی‌ها استفاده شده است.

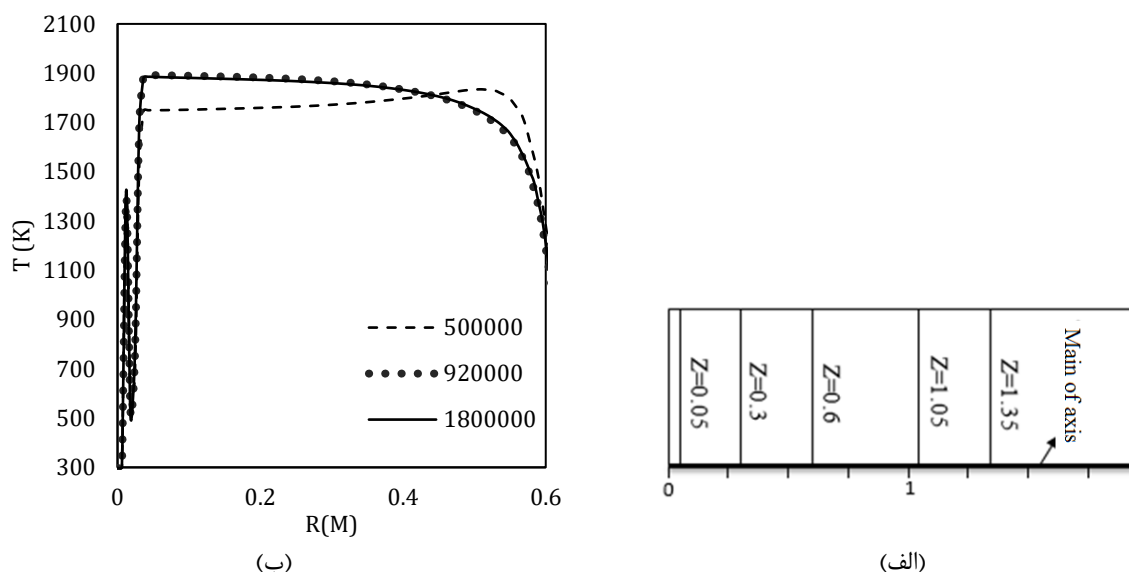


Figure 7- a) The radial sections examined to solution presentation b) The results of radial distributions of temperature at a distance of 5 cm for three different grid

شکل ۷- الف) مقاطع شعاعی مورد بررسی جهت ارائه نتایج ب) نتایج توزیع دما در مقطع شعاعی در فاصله ۵ سانتی‌متر برای سه شبکه مختلف

به منظور انجام شبیه‌سازی کوره سوخت-اکسیژن مورد نظر از مدل احتراقی PaSR^۱ موجود در حلگر ReactingFoam استفاده شده است. این مدل، با توجه به بررسی‌های صورت گرفته در مراجع [۲] و [۳]، دقت بسیار خوبی در پیش‌بینی نتایج احتراق متان-اکسیژن دارد. همچنین، به منظور مدل‌سازی اغتشاشی از مدل k-ε استاندارد استفاده شده است. با توجه به اهمیت تشعشع به علت دمای بالای گازها در احتراق سوخت-اکسیژن از مدل تشعشعی DO^۲ استفاده شده است. به منظور محاسبه ضرایب جذب و گسیل از مدل WSGGM^۳ استفاده شده است.

از طرفی، یکی از موضوعات بسیار مهم که شبیه‌سازی احتراق سوخت-اکسیژن را به شدت تحت تاثیر قرار می‌دهد انتخاب سینتیک شیمیایی مناسب است. یین و همکارانش، در سال ۲۰۱۱ [۲]، با اصلاح سینتیک اندرسون، دو سینتیک جدید دو و چهارمرحله‌ای به منظور شبیه‌سازی احتراق متان-اکسیژن ارائه کردند. آن‌ها با شبیه‌سازی کوره احتراق متان-اکسیژن IFRF به این نتیجه رسیدند که سینتیک‌های جدید پیش‌بینی قابل قبولی از مقادیر آزمایشگاهی دارند. از این رو، از سینتیک ارائه شده توسط یین و همکارانش به منظور شبیه‌سازی کار حاضر، مطابق جدول ۴، استفاده شده است.

جدول ۴- سینتیک چهارمرحله‌ای اصلاح شده توسط یین و همکاران [۲]

Table 4- Four-step kinetics modified by Yin et al [2]

| Reaction no. | Reaction | A | B | $E_a \left[\frac{cal}{mol} \right]$ | Reaction orders |
|--------------|--|----------|---|--------------------------------------|-----------------------------|
| JL1 | $CH_4 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO + 2H_2$ | 7.82 e13 | 0 | 30.1 e3 | $[CH_4]^{0.5} [O_2]^{1.25}$ |
| JL2 | $CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$ | 3.00 e11 | 0 | 30.1 e3 | $[CH_4]^1 [H_2O]^1$ |

۱. Partially Stirred Reactor combustion model

۲. Discrete Ordinates

۳. Weighted-sum-of-gray-gases model

| | | | | | |
|-----|--|----------|---|---------|----------------------|
| JL3 | $H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons H_2O$ | 1.79 e13 | 0 | 34.9 e3 | $[O_2]^{0.5}[H_2]^1$ |
| JL4 | $CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$ | 2.75 e12 | 0 | 20.0 e3 | $[CO]^1[H_2O]^1$ |

اعتبارسنجی نتایج سه بعدی به دست آمده

پس از انتخاب شبکه مناسب، نتایج عددی مربوط به شبکه استقلال یافته با نتایج تجربی، به منظور اعتبارسنجی و صحیح بودن شبیه سازی حاضر، مقایسه می شوند. در شکل ۸-الف، اعتبارسنجی توزیع سرعت در مقطع عرضی به طول ۵ سانتی متر از ابتدای کوره نشان داده شده است. همان گونه که مشاهده می شود، نتایج سرعت تطابق خوبی با نتایج تجربی دارند.

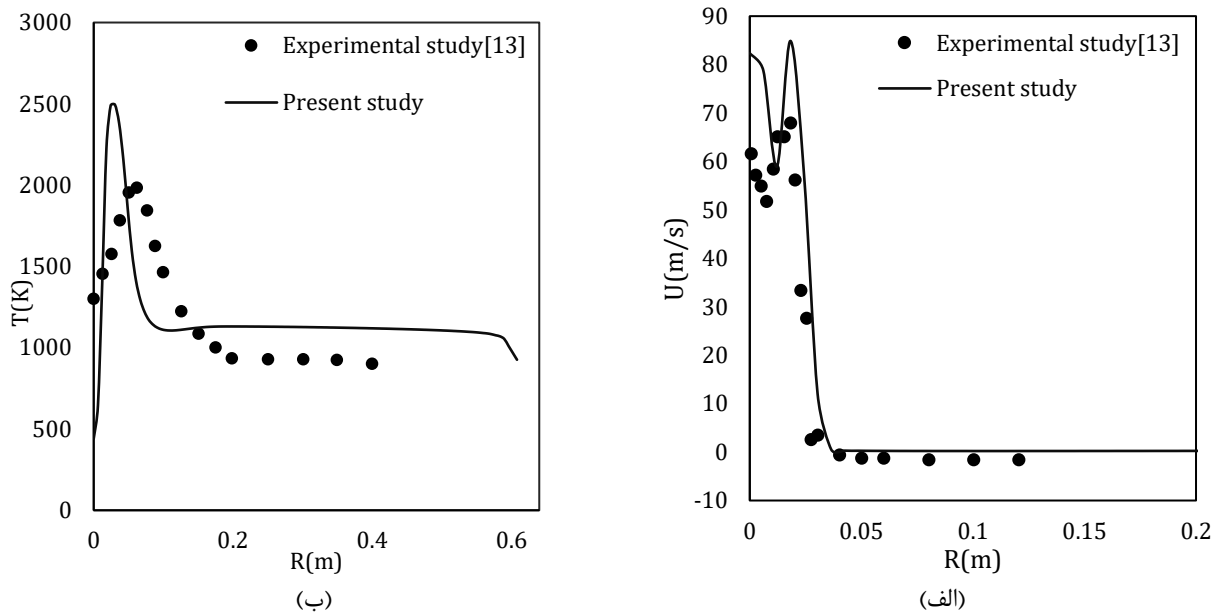


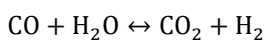
Figure 8- a) Comparison of velocity distribution with experimental results at a cross section of 5 cm b) Comparison of the temperature distribution with experimental results at a cross section of 0.6 m

شکل ۸-الف) مقایسه توزیع سرعت با نتایج تجربی در مقطع عرضی به فاصله ۵ سانتی متر، ب) مقایسه توزیع دما با نتایج تجربی در مقطع عرضی به فاصله ۰/۶ متر

در شکل ۸-ب، اعتبارسنجی توزیع دما در مقطع شعاعی به طول ۶۰ سانتی متر از ابتدای کوره نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود، تطابق خوبی بین داده های آزمایشگاهی و حل عددی وجود دارد. مقدار خطای متوسط در مقاطع مختلف نیز محاسبه شده است که برای این مقطع برابر با ۲۰ درصد است.

تزریق CO₂ به جریان اکسیدکننده

تزریق گاز CO₂ (بازچرخش خشک گازهای حاصل از احتراق) در احتراق سوخت-اکسیژن به منظور کاهش دمای شعله و توزیع یکنواخت تر دما درون کوره انجام می شود. گاز CO₂، به علت ظرفیت حرارتی بالایی که دارد، موجب کاهش دمای شعله و توزیع یکنواخت تر حرارت درون کوره می شود. در سینتیک چهارمرحله ای، تاثیر شیمیایی تزریق CO₂ به صورت برگشت واکنش (۳) نشان داده شده است. افزایش غلظت CO₂ موجب تجزیه این گونه از مسیر معکوس این واکنش می شود. بنابراین، تزریق CO₂ به درون محفظه احتراق سوخت-اکسیژن منجر به تجزیه CO₂ و تولید CO بالاتر و H₂ کمتر خواهد شد.



در شکل ۹-الف، تاثیر تزریق CO₂ در کسر جرمی‌های مختلف بر روی کسر مولی سوخت، بر روی محور اصلی کوره، در احتراق سوخت-اکسیژن نشان داده شده است. در شکل ۹-الف، مشاهده می‌شود که با افزایش درصد تزریق CO₂ تجزیه سوخت، که در اینجا تنها متان است، افزایش می‌یابد. علت این است که در حالتی که بخشی از اکسیدکننده (کسر جرمی O₂) با CO₂ جایگزین می‌شود، با توجه به اینکه سرعت ورودی و سطح مقطع ورودی ثابت است، دبی جرمی ورودی و در نتیجه تکانه جریان اکسیدکننده افزایش می‌یابد و این افزایش تکانه باعث مکش بیشتر جریان سوخت به درون جریان اکسیدکننده می‌شود؛ بنابراین افزایش تزریق CO₂ موجب اکسیدشدن سریع‌تر سوخت در این حالت می‌شود. در شکل ۹-ب، تاثیر تزریق CO₂ در کسر جرمی‌های مختلف بر روی توزیع دما بر روی محور اصلی کوره در احتراق سوخت-اکسیژن نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل ۹-ب نشان داده شده است، با افزایش درصد تزریق CO₂، به علت بالابودن ظرفیت حرارتی CO₂، دما کاهش می‌یابد.

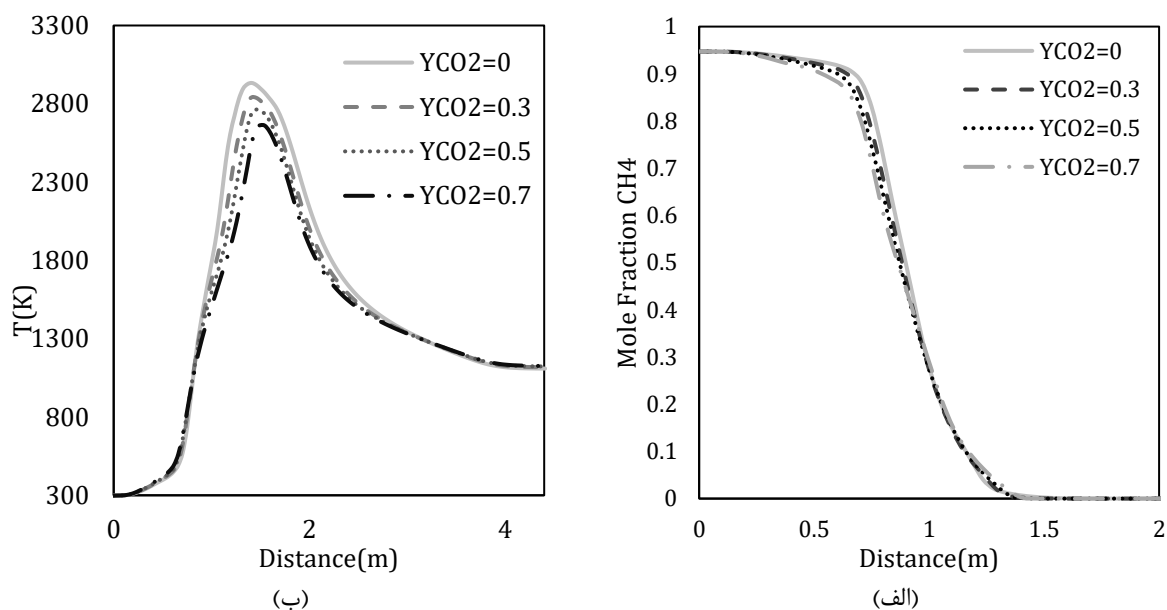
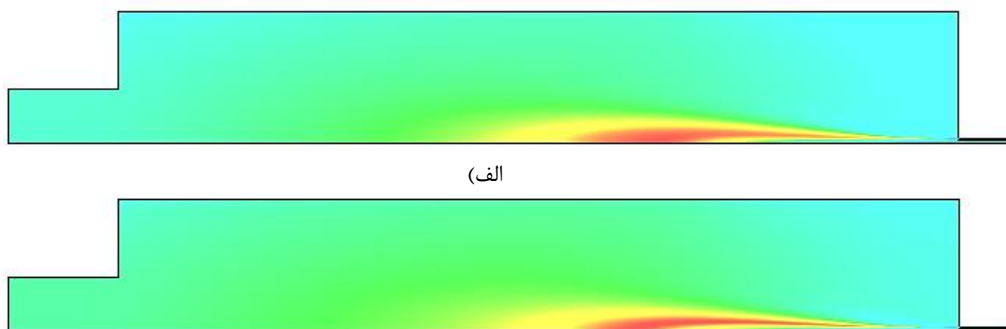


Figure 9- a) Effect of the various mass fractions CO₂ injection on fuel mole fraction b) Effect of various mass fractions CO₂ injection on distribution of temperature along the furnace length

شکل ۹-الف) تاثیر تزریق CO₂ در کسر جرمی‌های مختلف بر روی کسر مولی سوخت، ب) تاثیر تزریق CO₂ در کسر جرمی‌های مختلف بر روی توزیع دما در طول کوره

در شکل ۱۰، مقایسه کانتور توزیع دما درون کوره برای دو حالت بدون تزریق CO₂ (YO₂=1, YCO₂=0) و حالتی که ۷۰ درصد جرمی از O₂ در اکسیدکننده با CO₂ جایگزین می‌شود (YO₂=0.3, YCO₂=0.7) نشان داده شده است. از این شکل نیز مشاهده می‌شود که میزان بیشینه دما در اثر تزریق CO₂ کاهش یافته و توزیع دمای یکنواخت‌تری در کوره داریم.



(ب)



Figure 10- Comparison of temperature distribution inside the oxy-fuel combustion furnace for two injection modes a) $Y_{CO_2} = 0$ b) $Y_{CO_2} = 0.7$

شکل ۱۰- مقایسه توزیع دما درون کوره احتراق سوخت-اکسیژن برای دو حالت تزریق الف) $Y_{CO_2}=0$ ، ب) $Y_{CO_2}=0.7$

با مقایسه دو شکل ۱۰-الف و ۱۰-ب، مشاهده می‌شود که تزریق CO_2 به جریان اکسیدکننده موجب افزایش دما در بخش انتهایی کوره نسبت به حالت بدون تزریق شده است؛ علت این موضوع این است که تزریق CO_2 باعث افزایش غلظت CO_2 در ناحیه واکنشی و جذب بخشی از گرمای آزاد شده از واکنش‌های احتراقی توسط این گاز می‌شود. گاز CO_2 بخشی از انرژی جذب شده در ناحیه واکنشی را در طول مسیر حرکت به سمت انتهای کوره از طریق انتقال حرارت تشعشی به محفظه احتراق آزاد می‌کند. علاوه بر این، بازچرخش بخشی از گاز CO_2 از بخش انتهایی کوره، به دلیل کاهش سطح مقطع، نیز، باعث افزایش انتقال حرارت بیشتر و توزیع یکنواخت‌تر حرارت درون کوره می‌شود. بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که تزریق CO_2 سبب توزیع یکنواخت‌تر حرارت درون کوره می‌شود. از طرف دیگر، مشاهده می‌شود که دمای گازهای خروجی از دودکش در حالت تزریق بیشینه CO_2 ، نسبت به حالت بدون تزریق، ۲۰ کلوین بیشتر است؛ یعنی گاز CO_2 بخشی از حرارت جذب شده در ناحیه واکنشی را با خروج از دودکش به هدر می‌دهد. افزایش دمای گازهای خروجی از دودکش باعث کاهش بازده احتراق می‌شود. در نتیجه، با مقایسه دمای گازهای خروجی از دودکش در درصدهای مختلف تزریق CO_2 به جریان اکسیدکننده، می‌توان نتیجه گرفت که افزایش درصد تزریق CO_2 درون اکسیدکننده باعث افزایش دمای گازهای خروجی از دودکش می‌شود.

در شکل ۱۱-الف، تاثیر تزریق CO_2 بر روی کسر مولی مونوکسیدکربن (X_{CO}) در طول کوره بر روی محور اصلی نشان داده شده است. در جدول ۵، مقادیر بیشینه دما و کسر مولی مونوکسیدکربن در طول کوره برای کسر جرمی‌های مختلف تزریق CO_2 نشان داده شده است. در حالتی که ۳۰ درصد جرمی از O_2 در اکسیدکننده با CO_2 جایگزین می‌شود ($Y_{O_2}=0.7$ ، $Y_{CO_2}=0.3$) دمای بیشینه درون کوره نسبت به حالت بدون تزریق CO_2 ($Y_{O_2}=1$ ، $Y_{CO_2}=0$) ۹۳ کلوین کاهش می‌یابد. این مقدار برای حالتی که ۵۰ درصد جرمی از O_2 در اکسیدکننده با CO_2 جایگزین می‌شود ($Y_{O_2}=0.5$ ، $Y_{CO_2}=0.5$) ۱۷۱ کلوین است. در حالتی که ۷۰ درصد جرمی از O_2 در اکسیدکننده با CO_2 جایگزین می‌شود ($Y_{O_2}=0.3$ ، $Y_{CO_2}=0.7$)، دمای بیشینه درون کوره نسبت به حالت بدون تزریق CO_2 ($Y_{O_2}=1$ ، $Y_{CO_2}=0$) ۲۷۱ کلوین کاهش می‌یابد. همچنین، در شکل ۹-ب و ۱۱-الف مشاهده می‌شود که با افزایش درصد تزریق CO_2 ، مکان بیشینه دما و بیشینه کسر مولی مونوکسیدکربن به سمت خروجی کوره حرکت می‌کند. علت این موضوع تاخیر در اشتعال در اثر تزریق CO_2 به جریان اکسیدکننده یا کشیده‌تر شدن شعله، به علت کاهش اکسیژن در دسترس جهت اکسید شدن سوخت، است.

در شکل ۱۱-الف مشاهده می‌شود که با افزایش درصد تزریق CO_2 کسر مولی مونوکسیدکربن افزایش می‌یابد. با توجه به اینکه سوخت (در اینجا متان) تقریباً به‌طور کامل اکسید می‌شود، بنابراین، علت افزایش کسر مولی مونوکسیدکربن تجزیه CO_2 با افزایش درصد تزریق است. در سینتیک چهار مرحله‌ای، تنها یک واکنش مربوط به تجزیه CO_2 وجود دارد که با افزایش درصد تزریق CO_2 نرخ انجام واکنش در جهت برگشت افزایش می‌یابد که این موضوع سبب افزایش CO و کاهش H_2 می‌شود. با توجه به مقادیر بیشینه X_{CO} در جدول ۵، مشاهده می‌کنیم که با افزایش درصد جرمی تزریق CO_2 از ۵۰ به ۷۰ مقدار بیشینه X_{CO} کاهش می‌یابد. علت این موضوع کاهش دمای بیشینه در $Y_{CO_2}=0.7$ نسبت به $Y_{CO_2}=0.5$ است. به عبارت دیگر، در حالت تزریق $Y_{CO_2}=0.7$ سهم کاهش دما در کاهش تجزیه CO_2 از سهم افزایش غلظت CO_2 ، که موجب افزایش تجزیه CO_2

می‌شود، بزرگ‌تر است. بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که مقدار بیشینه X-CO در اثر تزریق CO₂ در جریان اکسیدکننده، در کسر جرمی تزریق بین YCO₂=0.7 و YCO₂=0.5 تشکیل می‌شود.

با توجه به شکل ۱۱-الف و ناحیه‌ای که در آن مونوکسیدکربن بعد از رسیدن به مقدار بیشینه شروع به اکسیدشدن می‌کند، می‌توان مشاهده کرد که با افزایش درصد تزریق CO₂ اکسیدشدن مونوکسیدکربن با سرعت بالاتری انجام می‌شود (خطی که نشان‌دهنده کسر مولی مونوکسیدکربن است با شیب بالاتری کاهش می‌یابد). علت این است که اکسیدشدن مونوکسیدکربن با کاهش دما افزایش می‌یابد. در شکل ۱۱-ب، مقادیر متوسط CO، در فواصل مختلف برحسب ppm، در چند مقطع مختلف عرضی در طول کوره برای کسر جرمی‌های مختلف تزریق CO₂ با هم مقایسه شده است.

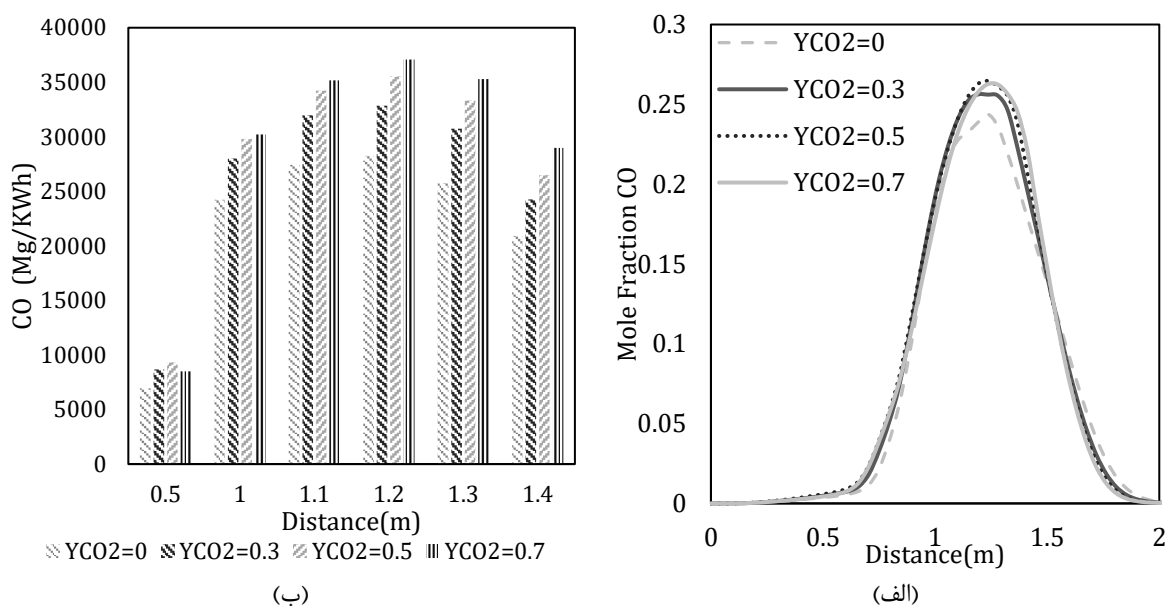


Figure 11- a) The effect of various mole factors CO₂ injection on carbon monoxide mole fraction along furnace length b) Comparison of the average level of carbon monoxide per ppm at different sections along furnace length for various mass fraction of CO₂ injection

شکل ۱۱-الف) تاثیر تزریق CO₂ در کسر جرمی‌های مختلف بر روی کسر مولی مونوکسیدکربن در طول کوره (ب) مقایسه مقدار متوسط سطحی مونوکسیدکربن برحسب ppm در مقاطع مختلف در طول کوره برای کسر جرمی‌های مختلف تزریق CO₂

Table 5- Maximum temperature and mole fraction of monoxide carbon along furnace length for various mass fraction of CO₂ injection

جدول ۵- مقادیر بیشینه دما و کسر مولی مونوکسیدکربن در طول کوره برای کسر جرمی‌های مختلف تزریق CO₂

| No | Mixture oxidizer | T _{max} | X _{CO} _{max} |
|----|---|------------------|--------------------------------|
| 1 | YO ₂ =1, YCO ₂ =0 | 2934 | 0.24372 |
| 2 | YO ₂ =0.7, YCO ₂ =0.3 | 2841 | 0.2562 |
| 3 | YO ₂ =0.5, YCO ₂ =0.5 | 2763 | 0.26466 |
| 4 | YO ₂ =0.3, YCO ₂ =0.7 | 2663 | 0.26246 |

همان‌طور که در شکل ۱۱-ب نیز مشخص است، مقدار متوسط مونوکسیدکربن، با افزایش درصد جرمی تزریق CO₂، افزایش می‌یابد و سپس کاهش می‌یابد که با دور شدن از جبهه شعله و کاهش دمای شعله مقدار آن نیز کاهش می‌یابد. در شکل ۱۲-الف، مقدار متوسط غلظت مونوکسیدکربن برحسب ppm در سطح مقطع عرضی ۲ متری از ابتدای کوره نشان داده شده است. با توجه به شکل ۱۲-الف، مشاهده می‌شود که مقدار متوسط غلظت مونوکسیدکربن در سطح مقطع عرضی ۲ متری با افزایش تزریق CO₂ کاهش یافته است. علت این موضوع، همان‌طور که قبلاً اشاره شد، کاهش دما در ناحیه واکنشی با افزایش درصد

جرمی تزریق CO_2 و افزایش اکسیدشدن مونوکسیدکربن است که باعث کاهش غلظت مونوکسیدکربن در مقطع ۲ متری با افزایش درصد جرمی تزریق CO_2 شده است.

در شکل ۱۲-ب، مقدار متوسط غلظت مونوکسیدکربن برحسب ppm در سطح مقطع عرضی ۳ متری از ابتدای کوره نشان داده شده است. با توجه به شکل ۱۲-ب، مشاهده می شود که مقدار متوسط غلظت مونوکسیدکربن در سطح مقطع عرضی ۳ متری، با افزایش تزریق CO_2 ، افزایش یافته است. علت این است که آزادکردن بخشی از حرارت جذب شده توسط گاز CO_2 در بعد از ناحیه واکنشی (نیمه انتهایی کوره) باعث افزایش دما در این ناحیه می شود و بالاتر بودن دما در حالت تزریق CO_2 باعث کاهش نرخ واکنش اکسیدشدن مونوکسیدکربن نسبت به حالت بدون تزریق می شود.

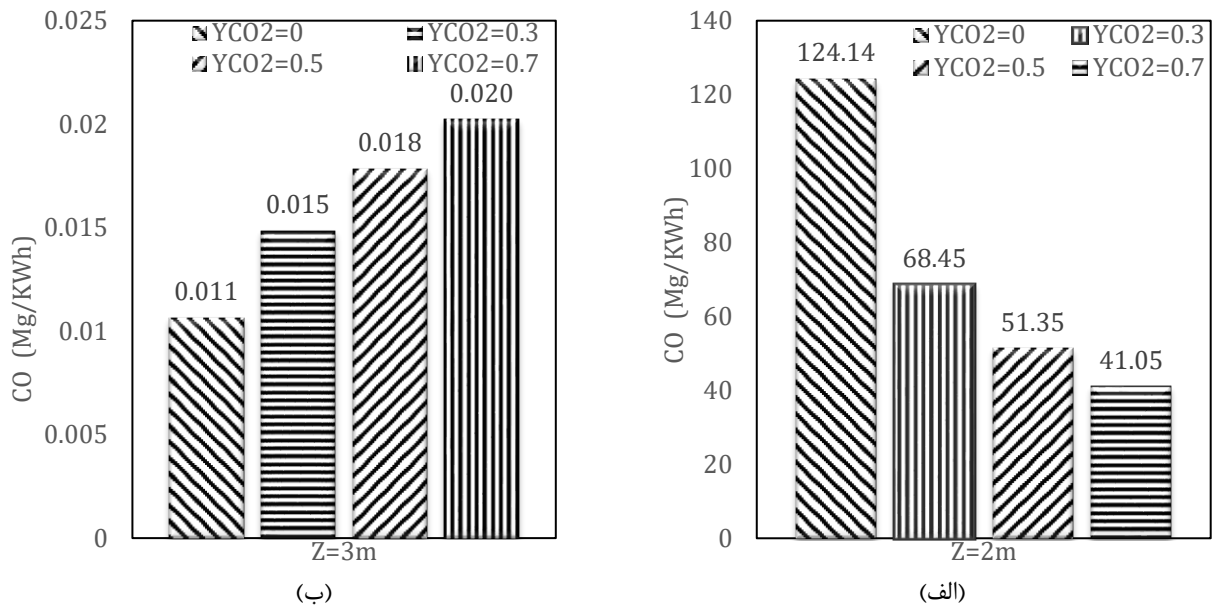


Figure 12- Comparison of area average amount of carbon monoxide per ppm for different mass fractions CO_2 injection in cross sectional of a) 2 m, b) 3 m

شکل ۱۲- مقایسه مقدار متوسط سطحی مونوکسیدکربن برحسب ppm برای کسر جرمی های مختلف تزریق CO_2 در سطح مقطع عرضی (الف) ۲ متر، (ب) ۳ متر

بررسی اثر تزریق $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ به همراه CO_2 به جریان اکسیدکننده

با توجه به نتایج حل یک بعدی به عنوان یک روش کاهش تولید CO_2 در ناحیه شعله تزریق $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ به همراه CO_2 به جریان اکسیدکننده بررسی می شود. در شکل ۱۳-الف و ۱۳-ب، به ترتیب مقایسه توزیع دما و کسر مولی مونوکسیدکربن در طول محور اصلی کوره، برای حالت ۵۰ درصد جرمی تزریق CO_2 در ورودی و حالتی که ۲۰ درصد جرمی CO_2 با $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ جایگزین شده است، نشان داده شده است.

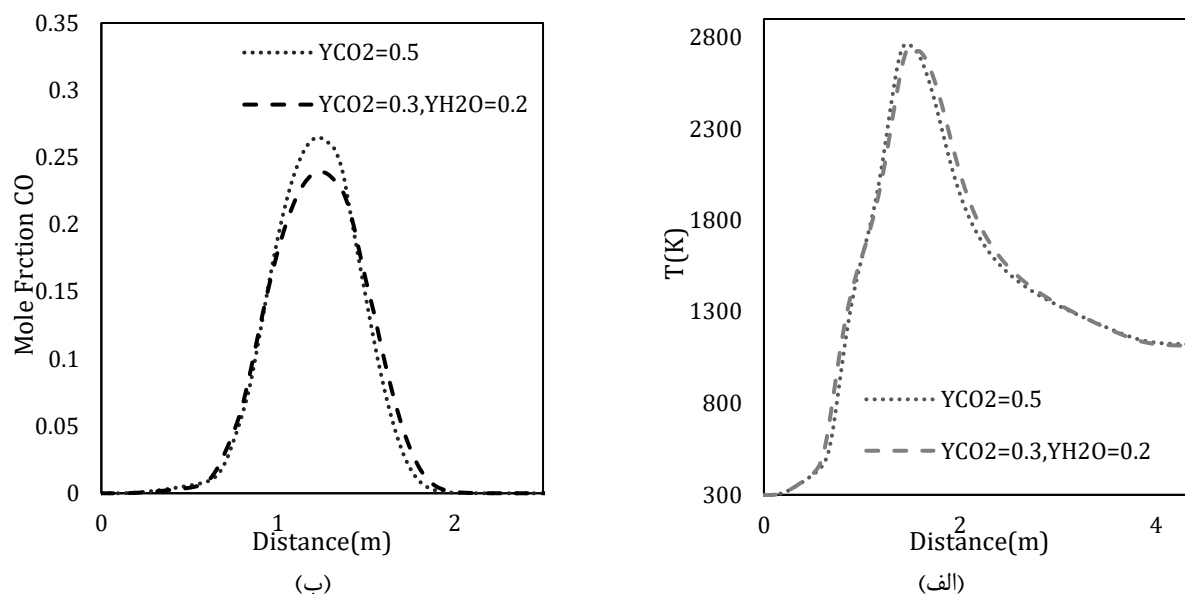


Figure 13- The effect of replacing part of CO₂ with H₂O(g) on a) temperature distribution b) mole fraction of carbon monoxide

شکل ۱۳- تاثیر جایگزینی بخشی از CO₂ با H₂O(g)، بر روی الف) توزیع دما، ب) کسر مولی مونوکسیدکربن مقادیر بیشینه دما و مونوکسیدکربن، برای دو حالت مختلف تزریق ۵۰ درصد جرمی CO₂ و حالتی که ۲۰ درصد جرمی CO₂ با H₂O(g) جایگزین شده است، در جدول ۶، داده شده است.

جدول ۶- مقادیر بیشینه دما و کسر مولی مونوکسیدکربن در طول کوره برای حالت بدون تزریق بخار آب و با تزریق بخار آب

Table 6- Maximum temperature and mole fraction of monoxide carbon along furnace length for without injection vapor stem and with injection vapor steam

| No | Mixture oxidizer | T _{max} (K) | X _{CO} _{max} |
|----|--|----------------------|--------------------------------|
| 1 | YO ₂ =0.5, YCO ₂ =0.5 | 2763 | 0.26466 |
| 2 | YO ₂ =0.5, YCO ₂ =0.3, YH ₂ O=0.2 | 2749 | 0.23944 |

همان طور که در جدول ۶ آورده شده است، با جایگزینی H₂O(g) به جای CO₂، به علت ظرفیت حرارتی بالاتر بخار آب، کسر مولی مونوکسیدکربن بیشینه در این حالت کاهش می یابد که علت آن کاهش غلظت CO₂ به علت جایگزینی بخشی از آن با H₂O(g) و همچنین کاهش تجزیه CO₂ به علت کاهش دماست. علاوه بر این، تزریق H₂O(g) باعث افزایش اکسید شدن CO از طریق واکنش (۳) می شود.

در شکل ۱۴، تاثیر تزریق CO₂ و H₂O(g) بر روی میزان انتشار مونوکسیدکربن خروجی از محفظه احتراق بر حسب میلی گرم بر کیلووات ساعت نشان داده شده است.

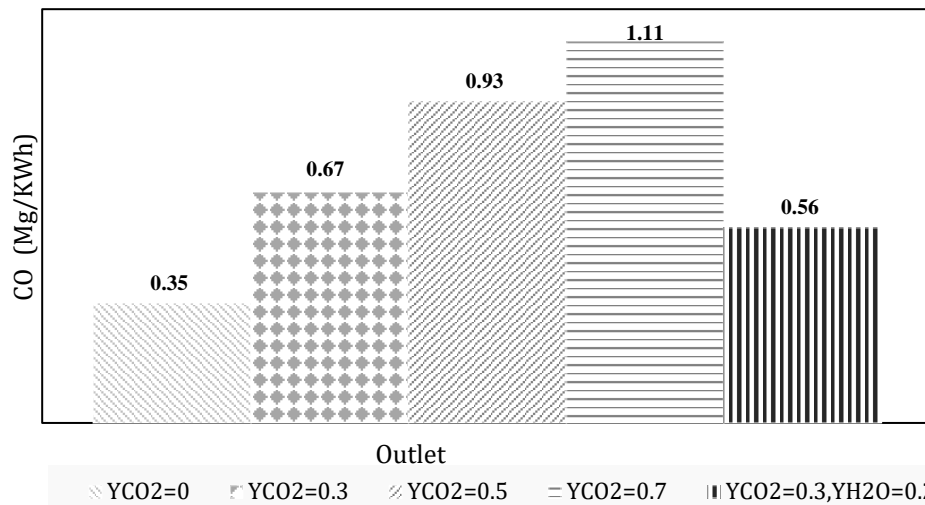


Figure 14- The effect of injections of CO₂ and H₂O(g) on the amount of emission carbon monoxide in the output per ppm
شکل ۱۴- اثر تزریق CO₂ و H₂O(g) بر روی میزان انتشار مونوکسید کربن در خروجی بر حسب ppm

همان طور که در شکل ۱۴ نشان داده شده است، با افزایش درصد جرمی تزریق CO₂ در اکسیدکننده، میزان انتشار CO در خروجی افزایش می یابد. این مقدار برای کسر جرمی های ۰، ۰/۳، ۰/۵، ۰/۷، YCO₂=۰/۷ در ورودی اکسیدکننده به ترتیب برابر ۰/۱، ۱/۷۶، ۲/۳۲، ۲/۶۱ است. با تزریق H₂O(g)، به جای بخشی از CO₂، میزان انتشار CO در خروجی کاهش می یابد. مقدار مونوکسید کربن خروجی برای YCO₂=۰/۵ برابر ۲/۳۲ ppm است که با جایگزینی ۲۰ درصد کسر جرمی CO₂ با H₂O(g) این مقدار به ۱/۶۲ ppm در خروجی کاهش می یابد. با توجه به شکل ۱۴، می توان نتیجه گرفت که غلظت بالای CO در ناحیه واکنشی دلیلی بر بالا بودن غلظت مونوکسید کربن در خروجی کوره نیست، زیرا مونوکسید کربن در ناحیه پایین دست شعله یا ناحیه دم پایین تقریباً به طور کامل اکسید می شود [۱۴]. بنابراین، می توان نتیجه گرفت که تزریق CO₂ باعث یکنواخت تر شدن توزیع حرارت درون محفظه احتراق می شود. از طرف دیگر، تزریق CO₂ باعث کاهش بازده احتراق به علت بالا بودن دما (اتلاف حرارت) و بالا بودن غلظت مونوکسید کربن در خروجی کوره می شود.

جمع بندی

در مطالعه حاضر، به بررسی یک بعدی و سه بعدی تزریق دی اکسید کربن بر روی توزیع دما و تشکیل کربن مونوکسید در فرایند احتراق پرداخته شد. در بررسی یک بعدی، با توجه به زمان پایین بودن شبیه سازی ها، اثر تزریق هیدروژن درون سوخت و بخار آب درون اکسیدکننده به جای بخشی از CO₂، به عنوان راهکاری در جهت کاهش میزان آلاینده مونوکسید کربن درون کوره، بررسی شد. در ادامه، با توجه به نتایج شبیه سازی یک بعدی، به بررسی تاثیر تزریق بخار آب بر روی کاهش مونوکسید کربن داخل کوره پرداخته شد. نتایج به دست آمده از این بررسی عبارتند از:

- ۱- تزریق CO₂ درون محفظه احتراق منجر به افزایش میزان کربن مونوکسید تولید شده درون کوره و خروجی آن می شود. مهم ترین واکنشی که در افزایش تولید کربن مونوکسید نقش ایفا می کند واکنش $CO_2 + H \rightarrow CO + OH$ است.
- ۲- تزریق هیدروژن درون سوخت، به علت کاهش میزان کربن سوخت، به عنوان راهکاری جهت کاهش میزان CO تولید شده در فرایند احتراق بررسی شد. نتایج به دست آمده نشان می دهد که سوخت هیدروژن، به علت ارزش حرارتی بالاتری که نسبت به سوخت متان دارد، موجب افزایش دما و افزایش نرخ واکنش های تجزیه CO₂ و در نتیجه افزایش تولید CO می شود و این کار روش مناسبی جهت کاهش مونوکسید کربن نیست.

۳- با توجه به بالاتر بودن ظرفیت حرارتی H_2O نسبت به CO_2 ، و همچنین کاهش میزان کربن موجود در اکسیدکننده، به علت عدم وجود کربن در بخار آب، استفاده از این گونه درون اکسیدکننده به جای CO_2 منجر به کاهش میزان CO تولیدی می شود. البته، با توجه به مشکل ایجاد خوردگی، امکان استفاده از مقادیر بالای بخار آب درون اکسیدکننده وجود ندارد.

منابع

1. L. Zheng, *Oxy-fuel combustion for power generation and carbon dioxide (CO_2) capture*, Elsevier, 2011.
2. C. Yin, L. A. Rosendahl and S. K. Kær, "Chemistry and radiation in oxy-fuel combustion: a computational fluid dynamics modeling study," *Fuel*, 90, No. 7, 2011, pp. 2519-2529.
3. C. Galletti, G. Coraggio and L. Tognotti, "Numerical investigation of oxy-natural-gas combustion in a semi-industrial furnace: validation of CFD sub-models," *Fuel*, 109, 2013, pp. 445-460.
4. J. Andersen, C. L. Rasmussen, T. Giselsson and P. Glarborg, "Global combustion mechanisms for use in CFD modeling under oxy-fuel conditions," *Energy & Fuels*, 23, No. 3, 2009, pp. 1379-1389.
5. P. Glarborg and L. L. Bentzen, "Chemical effects of a high CO_2 concentration in oxy-fuel combustion of methane," *Energy & Fuels*, 22, No. 1, 2007, pp. 291-296.
6. L. Chen and A. F. Ghoniem, "Modeling CO_2 Chemical Effects on CO Formation in Oxy-Fuel Diffusion Flames using Detailed, Quasi-Global, and Global Reaction Mechanisms," *Combustion Science and Technology*, 186, No. 7, 2014, pp. 829-848.
7. A. Amato, D. Scarborough and T. C. Lieuwen, "Methane Oxy-Combustion for Low CO_2 Cycles: Measurements and Modeling of CO and O_2 Emissions," *ASME Turbo Expo, Scottish Exhibition & Conference Centre*, Glasgow, United Kingdom, 2010, pp. 213-222.
8. A. Amato, B. Hudak and T. Lieuwen, "Measurements and analysis of CO and O_2 emissions in $CH_4/CO_2/O_2$ flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, 33, No. 2, 2011, pp. 3399-3405.
9. "ANSYS CHEMKIN THEORY MANUAL 17.0" ANSYS Reaction Design: San Diego, 2016.
10. <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html> (visited at. 2016 February)
11. J. Lim, J. Gore and R. Viskanta, "A study of the effects of air preheat on the structure of methane/air counterflow diffusion flames," *Combustion and Flame*, 121, No. 1, 2000, pp. 262-274.
12. X. Li, H. Yang, X. Wang and D. Zhao, "Stretch extinction characteristics of CH_4/CO_2 versus $O_2/H_2O/CO_2$ and O_2/H_2O counterflow non-premixed flames at different oxidizer temperatures," *Fuel*, 186, 2016, pp. 648-655.
13. N. Lallemand, J. Dugue and R. Weber, *Analysis of the experimental data collected during the OXYFLAM-1 and OXYFLAM-2 experiments*, International Flame Research Foundation (IFRF) Doc No F 85/y/4, Velsen Noord, Netherlands, 1997.
14. S. Hjærtstam, K. Andersson, F. Johnsson and B. Leckner, "Combustion characteristics of lignite-fired oxy-fuel flames," *Fuel*, 88, No. 11, 2009, pp. 2216-2224.

English Abstract

Numerical study of hydrogen and steam injection in order to reduce Carbon monoxide production due to Carbon dioxide injection into Oxidizer in Oxy-Fuel combustion

Ali Asghari¹, Kiumars Mazaheri^{2*}, Alireza Alipour³ and Esmail Ebrahimi Fordoei⁴

1- Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, ali.asghari6990@gmail.com

2- Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, kiumars@modares.ac.ir

3- Department of Mechanical Engineering, Shahid Chamran University, Ahvaz, Iran, a.alipour@scu.ac.ir

4- Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, E.Ebrahimifordoei@modares.ac.ir

*Correspondent author

(Received: 2017.07.22, Received in revised form: 2017.09.13, Accepted: 2017.09.17)

In this article, steam injection into oxidizer and hydrogen injection into fuel are studied in order to reduce carbon monoxide production with CO_2 injection into oxidizer in oxy-fuel combustion. For this purpose, one dimensional simulations with a counter flow diffusion flame solver and three dimensional simulations with openFoam software were performed. In the one dimensional simulations, the effects of the injections on carbon monoxide emission index are investigated. The results indicate that injecting steam into the oxidizer decreases

carbon monoxide emission index, while injecting hydrogen into the fuel acts in reverse. In the three dimensional study, due to very high computational costs, only the effect of steam injection into oxidizer is investigated as a suitable solution for reducing carbon monoxide emissions. The results obtained in these simulations show that steam injection in the oxidizer reduces of carbon monoxide production in the reaction zone and also the emissions from the furnace outlet.

Keywords: Oxy-Fuel combustion, Water steam injection, CO₂ injection, Reduction of carbon monoxide production