

# بررسی اثر افزایش گاز هیدروژن بر احتراق گاز متان در رآکتور پلاگ با استفاده از مکانیزم کامل

ارسطو بهشتی<sup>۱</sup>، حمیدرضا ابراهیمی کبریا<sup>۲</sup>، اکبر غفوریان<sup>۳</sup>  
[arastoo@mehr.sharif.edu](mailto:arastoo@mehr.sharif.edu)

## چکیده

گاز طبیعی جایگزین مطلوبی برای سوخت‌های متداول و بهترین راه حل کوتاه مدت برای نیازهای اقتصادی و زیست محیطی است. برای بهبود فرآیند احتراق گاز طبیعی، راه‌های گوناگونی وجود دارد. از آن جمله می‌توان به غنی‌سازی سوخت با اکسیژن و یا هیدروژن اشاره نمود. در این بررسی اثرات افزایش هیدروژن بر گاز طبیعی در رآکتور پلاگ مورد مطالعه قرار گرفته است. این رآکتور از آن رو انتخاب شده است که می‌توان با آن رفتار برخی از جریانهای واکنشی و نیز سیستمهای حرارتی مانند محفظه احتراق توربین گاز را شبیه سازی نمود. نسخه سوم مکانیزم GRI-3.0 برای توصیف سینتیکی واکنش مورد استفاده قرار گرفته است. این مکانیزم شامل ۳۲۵ واکنش بنیادی و ۵۳ جزء شیمیایی می‌باشد که برای توصیف احتراق متان بهینه‌سازی شده است.

**واژه‌های کلیدی:** سینتیک شیمیایی - رآکتور پلاگ - مکانیزم شیمیایی.

## ۱- مقدمه

در سالهای اخیر سوخت‌های هیبریدی هیدروژن - هیدروکربن توجه خاصی را از لحاظ کاربردهای تولید قدرت به خود معطوف داشته است. نامحدود بودن منابع تولید هیدروژن و سازگاری آن با محیط زیست از عوامل جلب توجه محققان به این سوخت می‌باشد. رقیق سوزی هیدروکربنها باعث کاهش آلودگی هوا و بهبود فرایند احتراق می‌گردد. از آنجا که احتراق پایدار سوخت‌های هیدروکربنی در رژیمهای رقیق سوز امکان پذیر نیست و از طرفی امکان اشتعال هیدروژن در ناحیه بسیار رقیق کاملاً امکان پذیر است، لذا سوخت متشکل از مخلوط هیدروژن و هیدروکربن، بسیار مورد توجه واقع شده است. سرعت واکنش نسبتاً پایین سوخت‌های هیدروکربنی، بوسیله اختلاط آن با هیدروژن افزایش می‌یابد و در نتیجه باعث افزایش قابلیت آفرز و ماندگاری شعله می‌گردد. با اضافه کردن هیدروژن به سوخت‌های هیدروکربنی می‌توان از آنها در ناحیه مافوق صوت نیز استفاده نمود [۱]. هیدروژن به دلیل دارا بودن خصوصیات منحصر به فردی همچون کم بودن زمان تاخیر جرقه (*Ignition Delay*)، پایداری بسیار زیاد شعله باعث شده است که به عنوان تنها سوخت مورد استفاده در سیستمهای پیشرانس سرعت بالا همانند SCRAMJET مطرح شود [۲].

هیدروژن یک افزودنی بسیار عالی برای سایر سوخت ها، همانند گاز طبیعی، بنزین، الکل، دیزل و روغنهای گیاهی بشمار

۱- کارشناس ارشد مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف

۲- دانشجوی دکتری مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف

۳- استادیار دانشکده مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف

می‌رود. غنی سازی سوختها با هیدروژن، سبب کاهش آلاینده‌های هوا، از جمله مونوکسید کربن و هیدروکربن‌های نسوخته خواهد شد. اما در مقابل، پیچیدگی سیستم‌های ذخیره سازی، گرانی هزینه تولید و تجهیزات حمل و نقل و نیز افزایش اکسیدهای نیتروژن، از جمله معایب آن بشمار می‌رود [۳].

در این تحقیق سینتیک کامل احتراق مخلوط گاز طبیعی و هیدروژن با هوا در یک رآکتور پلاگ مدل سازی شده است. اثرات نسبت‌های توازن مختلف در مقادیر دما و آلاینده‌ها، خصوصاً اکسیدهای نیتروژن و اکسیدهای کربن بررسی شده است. همچنین اثرات مقادیر متفاوت درصد اختلاط هیدروژن با متان در موارد فوق مورد بررسی قرار گرفته است. از آنجا که کد CHEMKIN دارای دقت بسیار خوبی است، لذا برای تأیید کد نوشته شده، از حل PFR کد CHEMKIN استفاده گردیده است.

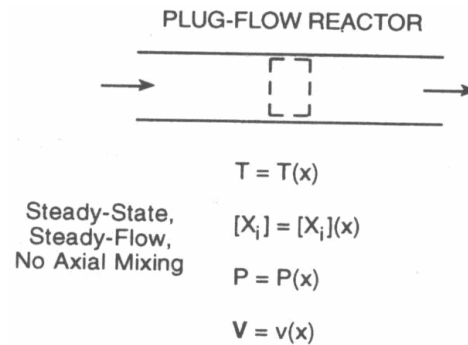
## ۲- مروری بر کارهای انجام شده

اولین بار، ریکاردو<sup>۲</sup>، با اضافه نمودن هیدروژن به موتور احتراقی، توانست راندمان بالاتری را بدست آورد. ارن و همکارانش، مزایای استفاده از هیدروژن را در کاهش آلودگی هوا بیان نمودند [۴]. در سال ۱۹۶۷ میلادی، مکانیزم شیمیایی کامل احتراق هیدروژن در شبیه سازی عددی در رآکتور کاملاً آمیخته<sup>۳</sup>، شعله‌های آرام<sup>۴</sup> و لوله شوک<sup>۵</sup> مورد استفاده قرار گرفت [۵]. دالگر<sup>۶</sup>، احتراق مخلوط ۲۰٪ هیدروژن و ۸۰٪ متان را در موتور SI بصورت عددی بررسی نمود [۶]. هاکس و چن با شبیه‌سازی مستقیم عددی، افزایش هیدروژن در حالت سوزش رقیق متان با هوا را با استفاده از مکانیزم کاهش‌یافته، مطالعه نمودند [۷].

## ۳- سینتیک رآکتور پلاگ

رآکتور پلاگ، معرف رآکتور ایده‌آلی است که دارای خصوصیات زیر باشد (شکل ۱):

- حالت پایا، جریان پایا
- عدم اختلاط در جهت محوری. این امر بیان می‌دارد که از نفوذ پذیری جرمی، مولکولی و یا توربولانس در جهت جریان صرف نظر می‌گردد.
- دارا بودن خواص یکنواخت در جهت عمود بر جریان یا فرض جریان یکنواخت. این بدان معنی است که در هر قسمت، سرعت، دما، غلظت و غیره کاملاً خصوصیات جریان را مشخص می‌سازد.
- جریان ایده‌آل بدون اصطکاک، این فرض امکان می‌دهد تا از معادلات ساده اولر برای فشار و سرعت استفاده نمود.
- رفتار گاز ایده‌آل، این فرض امکان می‌دهد تا از روابط ساده حالت، برای برقراری ارتباط بین دما، فشار، چگالی، جزء جرمی و انتالپی استفاده نمود.



شکل ۱: شمای رآکتور پلاگ.

#### ۴- معادلات حاکم

معادلات حاکم بر جریان در رآکتور شامل معادلات بقای جرم، ممنتوم، انرژی و جزءهای شیمیایی می‌باشد [۸].

بقای جرم:

$$\frac{d(\rho v_x A)}{dx} = 0 \quad (1)$$

بقای ممنتوم:

$$\frac{dP}{dx} + \rho v_x \frac{dv_x}{dx} = 0 \quad (2)$$

بقای انرژی:

$$\frac{d(h + v_x^2 / 2)}{dx} + \frac{\dot{Q}'' P}{\dot{m}} = 0 \quad (3)$$

بقای جزءهای شیمیایی

$$\frac{dY_i}{dx} - \frac{d\dot{\omega}_i MW_i}{\rho v_x} = 0 \quad (4)$$

در معادلات مذکور،  $\rho$  چگالی،  $v_x$  سرعت در جهت  $x$ ،  $A$  سطح مقطع جریان،  $P$  فشار،  $h$  انتالپی،  $\dot{Q}''$  فلاکس حرارتی،  $P$  محیط مقطعی رآکتور،  $\dot{m}$  نرخ جرمی،  $Y_i$  جزء جرمی،  $\dot{\omega}_i$  نرخ تولید جزء  $i$  ام،  $MW_i$  جرم مولکولی جزء  $i$  ام می‌باشد. با مشتق گیری از معادله حالت گاز کامل و استفاده از آن در معادلات فوق نتیجه می شود :

$$\frac{d\rho}{dx} = \frac{(1 - \frac{R_u}{c_p MW_{mix}}) \rho^2 v_x^2 (\frac{1}{A} \frac{dA}{dx}) + \frac{\rho R_u}{c_p v_x MW_{mix}} \sum_{i=1}^N MW_i \dot{\omega}_i (h_i - \frac{MW_{mix}}{MW_i} c_p T)}{P(1 + \frac{v_x^2}{c_p T}) - \rho v_x^2} \quad (5)$$

$$\frac{dT}{dx} = \frac{v_x^2}{\rho c_p} \frac{d\rho}{dx} + \frac{v_x^2}{\rho c_p} \frac{1}{A} \frac{dA}{dx} - \frac{1}{v_x \rho c_p} \sum_{i=1}^N h_i \dot{\omega}_i M W_i \quad (6)$$

$$\frac{dY_i}{dx} = \frac{\dot{\omega}_i M W_i}{\rho v_x} \quad (7)$$

که در آن  $T$  دما و  $N$  تعداد جزءهای شیمیایی می‌باشد. زمان اقامت ( $t_R$ ) نیز می‌تواند مورد محاسبه قرار گیرد

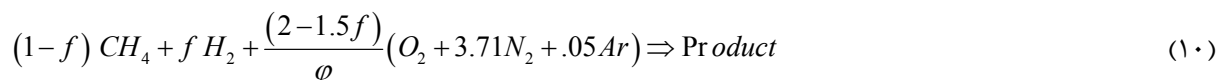
$$\frac{dt_R}{dx} = \frac{1}{v_x} \quad (8)$$

" $\dot{Q}$ " بدلیل آدیاباتیک بودن رآکتور، برابر صفر می‌باشد. برای انتگرال‌گیری از شرایط اولیه زیر استفاده شده است:

$$\begin{aligned} T(0) &= T_0 \\ \rho(0) &= \rho_0 \\ Y_i(0) &= Y_{i0} \quad i = 1, 2, \dots, N. \\ t_R(0) &= 0 \end{aligned} \quad (9)$$

به منظور بررسی اثر افزایش هیدروژن در مخلوط، ضریب  $f$  را که نمایانگر کسر حجمی هیدروژن در مخلوط هیدروژن-متان می‌باشد، معرفی می‌گردد.

با بکارگیری نسبت توازن می‌توان احتراق متان با هوا را بصورت زیر مدل سازی نمود:

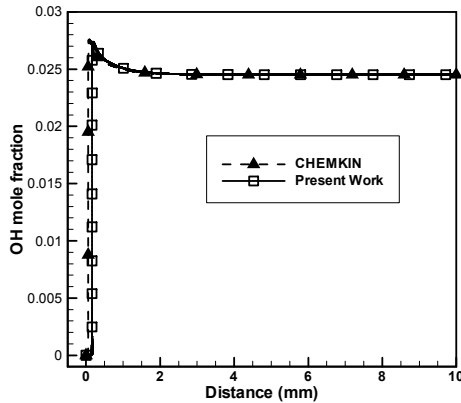


## ۵- روش حل

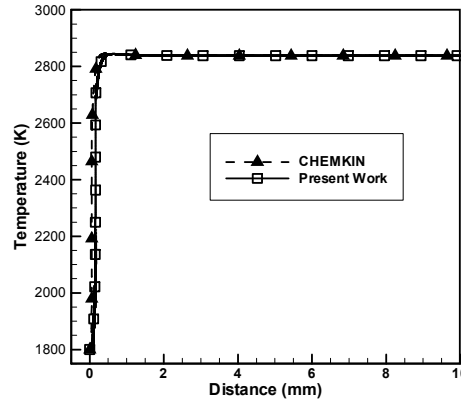
در این تحقیق از مکانیزم کامل متان (GRI-3.0) استفاده شده است. این مکانیزم شامل ۵۳ جزء شیمیایی و ۳۲۵ واکنش بنیادی می‌باشد. معادلات حاکم بر مسائل احتراقی از نوع معادلات دیفرانسیل سخت (Stiff) است، لذا برای حل معادلات سخت<sup>۷</sup> حاکم، از کد (CVODE) که بهمین منظور در آزمایشگاه ملی لارنس لیورمور آمریکا<sup>۸</sup> توسعه یافته، استفاده شده است [۹].

## ۶- نتایج

از آنجا که بسته نرم افزاری CHEMKIN مورد استفاده اکثر محققین بوده و نتایج آن از نظر دقت و صحت مورد تایید می‌باشد، لذا برای اعتبارسنجی کد نوشته شده، از حل PFR نرم افزار CHEMKIN استفاده شده است. شرایط مدل سازی و مقایسه، در دمای ۱۸۰۰ درجه سانتیگراد و در حالت استوکیومتری احتراق متان خالص با هوا انجام گرفته است. مقایسه بین پارامترهای اصلی همانند دما و غلظت جزء OH، تطابق بسیار خوبی را نشان می‌دهد (شکل‌های ۲ و ۳). اثرات مقادیر متفاوت درصد اختلاط هیدروژن با متان در نسبت توازن یک (استوکیومتری) برای دما و جزء OH، اکسیدهای کربن و آب، بررسی شده است.



شکل ۳: مقایسه پروفیل OH از مکانیزم کامل GRI-3.0 با CHEMKIN



شکل ۴: مقایسه پروفیل دمای خروجی از مکانیزم کامل GRI-3.0 با CHEMKIN

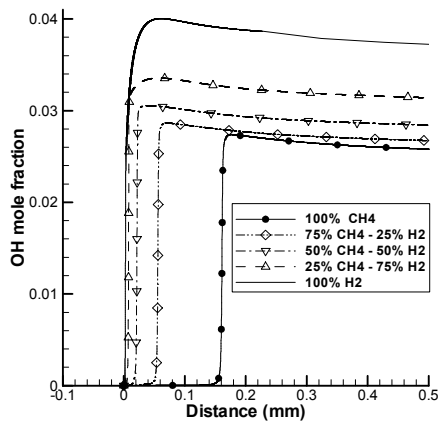
این بررسی در نسبت توازنهای مختلف همراه با درصدهای متفاوتی از مخلوط هیدروژن و متان صورت پذیرفته است. جزءهای شیمیایی اصلی احتراق همانند OH، O و H<sub>2</sub> و نیز میزان تولید اکسیدهای نیتروژن و کربن با توجه به پارامترهای  $f$  و  $\phi$  مورد بررسی و تحلیل قرار گرفته است.

#### الف) تاثیرات نسبت هیدروژن در مخلوط در نسبت توازن ثابت :

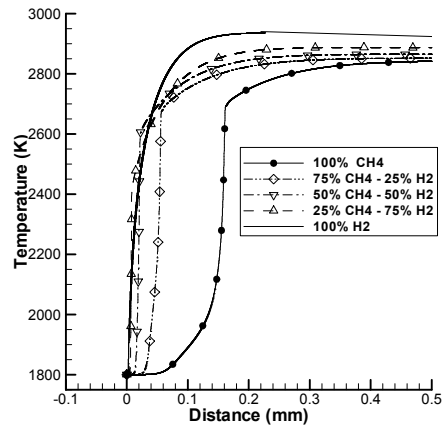
در این حالت در نسبت توازن ثابت برابر یک، نسبت هیدروژن در مخلوط از صفر تا صد درصد تغییر داده شده است.

#### دما

با افزایش میزان هیدروژن، بدلیل بالاتر بودن دمای احتراق آن نسبت به متان، حداکثر دمای تولید شده بیشتر خواهد شد (شکل-۴).



شکل (۵) - تغییرات کسر مولی OH در طول رآکتور در  $\phi = 1$



شکل (۴) - تغییرات دما در طول رآکتور در  $\phi = 1$

## رادیکال OH

غلظت این رادیکال نمایانگر ساختار جریان، ناحیه واکنش و دما می‌باشد. همانطور که در شکل (۵) نشان داده شده با افزایش میزان هیدروژن، غلظت این رادیکال نیز افزایش می‌یابد.

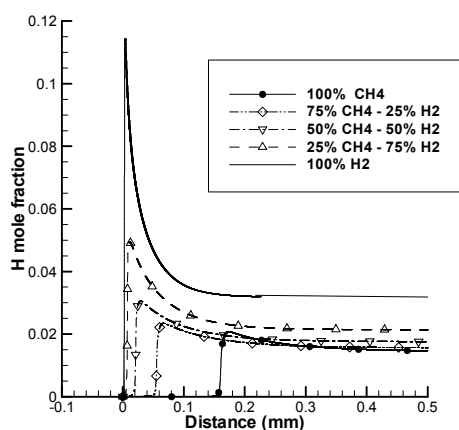
## اتم O

غلظت این جزء در بررسی رفتار شعله درحالات غنی سوز و رقیق سوز بسیار مهم بوده و از طرفی شاخص مهمی برای بررسی میزان تولید NOx و واکنشهای مربوط به آن است.

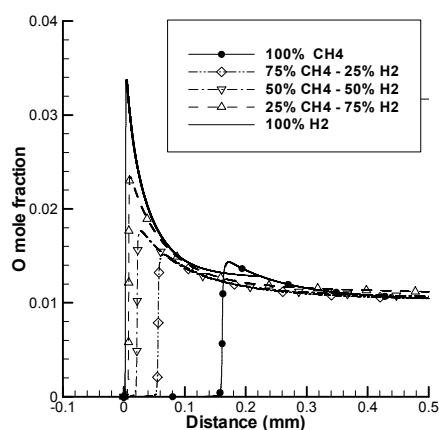
همانطور که در شکل (۶) نشان داده شده با افزایش میزان هیدروژن، غلظت این جزء نیز افزایش می‌یابد که علت آن برخورد بیشتر بین جسم سوم و جزءهای شیمیایی می‌باشد.

## اتم H

این جزء در پیشرفت واکنشها و سرعت بخشیدن به آنها، عامل موثری محسوب می‌گردد. همانطور که در شکل (۷) نشان داده شده است، با افزایش میزان هیدروژن، غلظت این جزء نیز افزایش می‌یابد که علت آن غالب شدن واکنشهای تشکیل H می‌باشد.



شکل (۷) - تغییرات کسر مولی H در طول رآکتور در  $\phi = 1$



شکل (۶) - تغییرات کسر مولی O در طول رآکتور در  $\phi = 1$

## اکسیدهای نیتروژن NOx

از جمله اصلی‌ترین عوامل آلوده کننده هوا بشمار می‌روند. لذا از این رو بررسی میزان و نحوه تولید آنها بسیا حائز اهمیت می‌باشد. واکنشهای مربوط به تشکیل NOx در دماهای بالای ۱۸۰۰ درجه سانتیگراد فعال شده [۸] و لذا افزایش دما عامل بسیار مهمی در تولید آنها محسوب می‌گردد. از طرفی غلظت جزء O که در تشکیل NOx نقش بسیار مهمی دارد، با افزایش هیدروژن و دما، زیاد شده و باعث ازدیاد تولید اکسیدهای نیتروژن می‌گردد. همانطور که در شکل‌های (۸) و (۹) نشان داده شده با افزایش میزان هیدروژن، غلظت این جزء نیز افزایش می‌یابد که علت آن برخورد بیشتر بین جسم سوم و جزءهای شیمیایی می‌باشد.

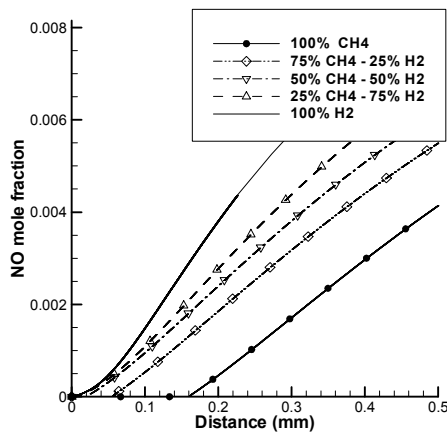
## اکسیدهای کربن

اکسیدهای کربن جزء گازهای گلخانه‌ای بوده و باعث گرم شدن کره زمین می‌گردند. لذا کاهش آنها می‌تواند در کاهش آلودگی

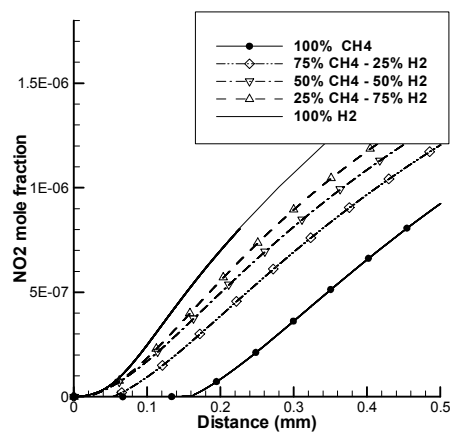
هوا بسیار موثر باشد. همانطور که در شکل‌های (۱۰) و (۱۱) نشان داده شده با افزایش میزان هیدروژن، غلظت CO و CO<sub>2</sub> کاهش یافته و در حالت هیدروژن خالص میزان تولید آلاینده CO به صفر می‌رسد.

### ب) تاثیرات نسبت توازن در $f$ ثابت

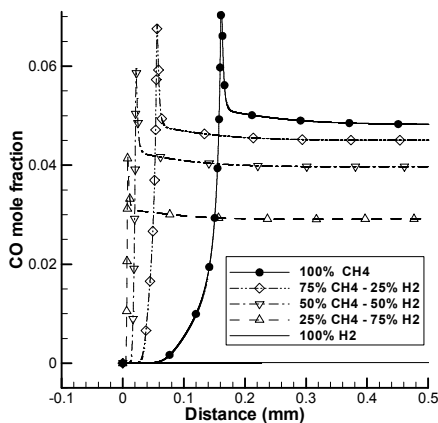
در این حالت برای یک نسبت ثابت از کسر مولی هیدروژن در مخلوط، تاثیرات نسبت توازن بررسی شده است. نسبت توازن از صفر تا صد درصد تغییر داده شده است. با افزایش نسبت توازن، ماکزیمم دمای احتراق بالاتر می‌رود و در حالت استوکیومتری به حداکثر مقدار خود می‌رسد (شکل ۱۲). جزءهای O، H و OH با افزایش نسبت توازن بطور چشمگیری افزایش می‌یابند (شکل‌های ۱۳، ۱۴ و ۱۵). اکسیدهای نیتروژن، بدلیل ازدیاد دما، افزایش می‌یابند (شکل‌های ۱۶ و ۱۷). اکسیدهای کربن نیز بدلیل ازدیاد دما و نیز فعال تر شدن واکنشهای C و C<sub>2</sub>، افزایش می‌یابند (شکل‌های ۱۸ و ۱۹).



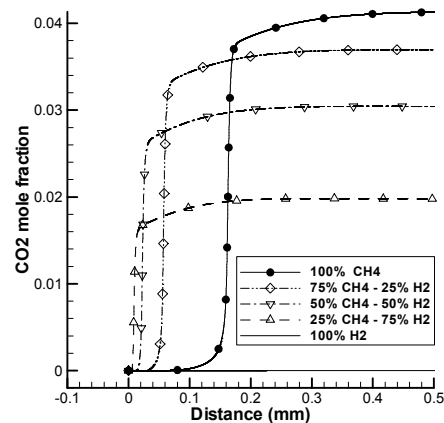
شکل (۹) - تغییرات کسر مولی NO در طول رآکتور در  $\phi = 1$



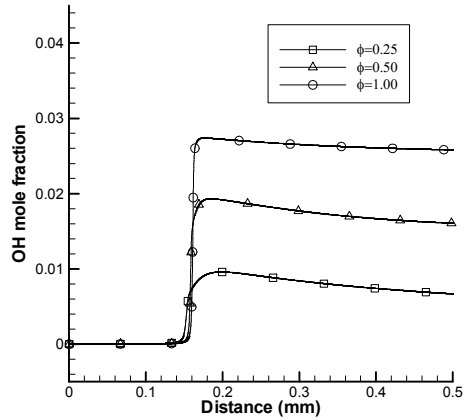
شکل (۸) - تغییرات کسر مولی NO<sub>2</sub> در طول رآکتور در  $\phi = 1$



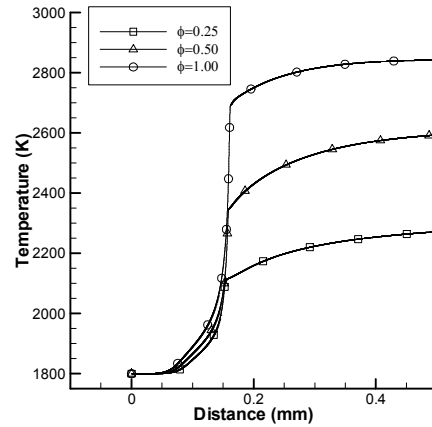
شکل (۱۱) - تغییرات کسر مولی CO در طول رآکتور در  $\phi = 1$



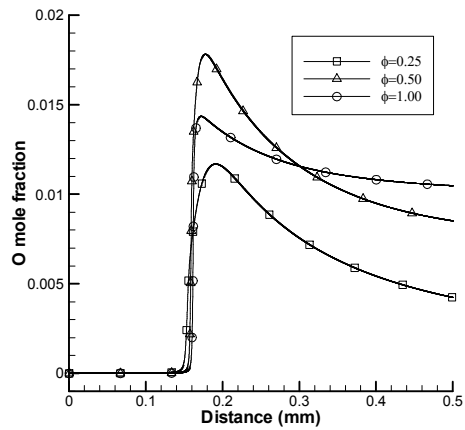
شکل (۱۰) - تغییرات کسر مولی CO<sub>2</sub> در طول رآکتور در  $\phi = 1$



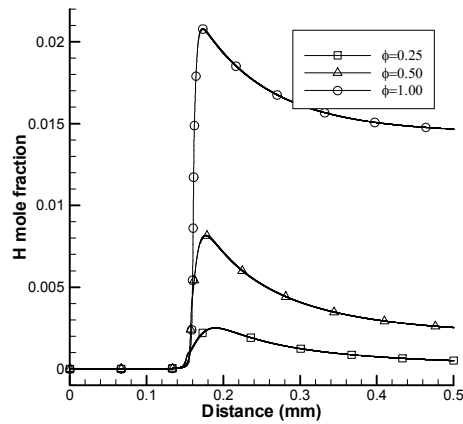
شکل (۱۳) - تغییرات کسر مولی OH در طول رآکتور در  $f = 0$



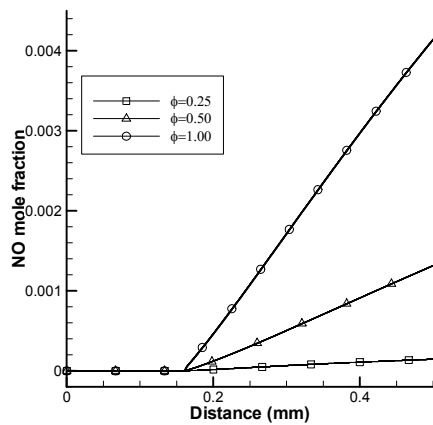
شکل (۱۲) - تغییرات دما در طول رآکتور در  $f = 0$



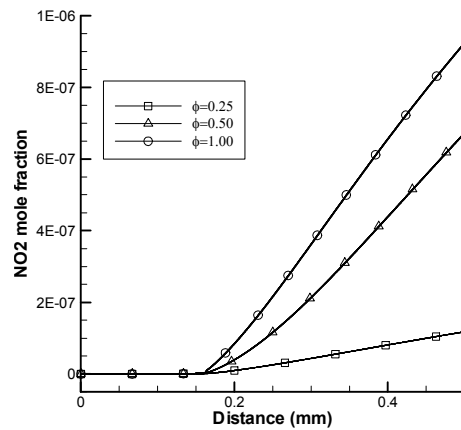
شکل (۱۵) - تغییرات کسر مولی O در طول رآکتور در  $f = 0$



شکل (۱۴) - تغییرات کسر مولی H در طول رآکتور در  $f = 0$

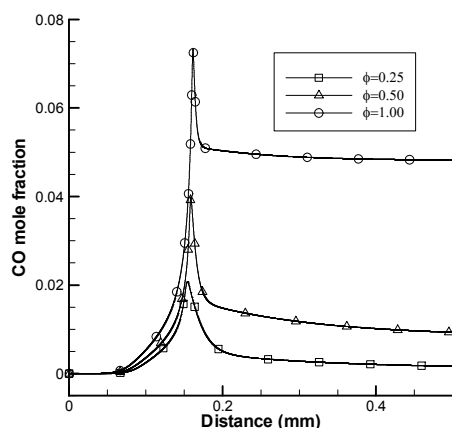


شکل (۱۷) - تغییرات کسر مولی NO در طول رآکتور در  $f = 0$

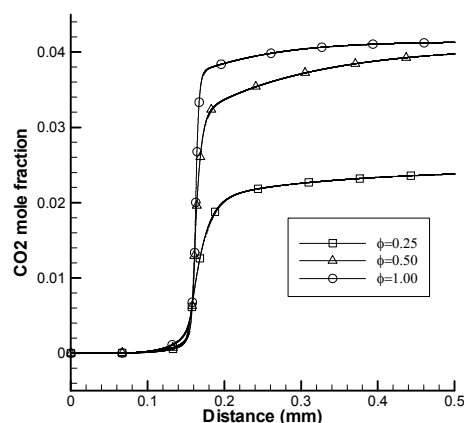


شکل (۱۶) - تغییرات کسر مولی NO2 در طول رآکتور در  $f = 0$





شکل (۱۹) - تغییرات کسر مولی CO در طول رآکتور در  $f = 0$



شکل (۱۸) - تغییرات کسر مولی CO<sub>2</sub> در طول رآکتور در  $f = 0$

## ۷- جمع بندی

سوخت هیدروژن یک افزودنی بسیار مناسب برای گاز متان می باشد و می تواند باعث بهبود فرآیند احتراق آن گردد. با افزودن هیدروژن به متان، درجه حرارت احتراق افزایش یافته و باعث کاهش تاخیر جرقه می گردد. آلاینده های هوا از جمله اکسیدهای کربن در اثر افزایش نسبت هیدروژن در مخلوط کاهش یافته اما در مقابل تولید اکسیدهای نیتروژن افزایش می یابد. در یک نسبت معین از هیدروژن در مخلوط، با افزایش نسبت توازن، درجه حرارت افزایش یافته و در حالت استوکیومتری، به حداکثر میزان خود می رسد. جزءهای شیمیایی نیز در حالت استوکیومتری در حداکثر میزان تولید خود قرار دارند.

## مراجع

- Bonghi, L., Dulap, M.J., Owens, M., Young, C.D., and Segal, C., "Piloted for Supersonic Combustion of Liquid Fuels," AIAA PAPER 950730 2000.
- Choudhuri, Ahasan R., "Experimental and Numerical Investigation on Hydrogen-Hydrocarbon Hybrid Fuel," PhD Thesis, University of Oklahoma, 2000.
- Bauer, C.G., Forest, T., "Effect of Hydrogen Addition on the Performance of Methane- Fueled Vehicles. Part I: Effect on S.I. Engine Performance," International Journal of Hydrogen Energy 26: 55-70 2001
- Aslan, E., Ergeneman, M., Sorousbay, C., "Use of Hydrogen in Internal Combustion Engine as Fuel," Istanbul Technical University, Istanbul, 1991
- Cathonnet, M., "Chemical Kinetic Modeling of Combustion from 1969 to 2019 " Combustion and Science Technology, Vol. 98 pp. 256-279, 1994
- Dulger, Z., "Numerical Modeling of Heat Release and Flame Propagation for Methane Fueled Internal Combustion Engines with Hydrogen Addition," PhD Thesis, University of Miami, 1991.
- Hawkes, E., R., Chen, J., H., "Direct Numerical Simulation of Hydrogen-Enriched Lean Premixed Methane-Air Flame," Combustion and Flame Vol. 138, pp. 242-258, 2004
- Turns S.R. and Mantel, S.J., An introduction to combustion , McGraw Hill, 2000
- Cohen, S., D., Hindmarsh, A., C., "CVODE, A Stiff/Nonstiff ODE Solver in C," Computers in Physics, Vol.10, No. 2, 1996