

## بررسی عددی اثر رقیق ساز CO<sub>2</sub> و اثر فشار روی شعله پیش آمیخته متان - هوا و تشکیل آلاینده ها

علی خسروی<sup>۱\*</sup>، محمد امیری<sup>۲</sup> سعید آذر برامان<sup>۳</sup>

دانشگاه آزاد اسلامی، واحد مشهد، گروه مکانیک، مشهد، ایران

(<sup>۱</sup> علی خسروی: [Alikhosravii@yahoo.com](mailto:Alikhosravii@yahoo.com))

### چکیده

افزایش رقیق ساز به واکنش، یکی از روش های کاهش حد اکثر دمای محفظه احتراق است که سبب کاهش تشکیل NO<sub>x</sub> حرارتی می شود. روش های کنترل تشکیل NO<sub>x</sub> همگی بر اساس کنترل دما یا محدود کردن غلظت اکسیژن استوار است. در این پژوهش اثر رقیق ساز CO<sub>2</sub> و اثر تغییرات فشار روی مخلوط پیش آمیخته متان-هوا مورد بررسی عددی قرار گرفته است. این شبیه سازی ها با استفاده از کد PREMIX نرم افزار CHEMKIN II انجام شده است. شبیه سازی عددی برای نسبت های رقیق سازی متفاوت و فشار های متفاوت انجام شده است. تاثیر رقیق ساز بر روی غلظت CH و تولید NO در فشارهای متفاوت بررسی شده است. نتایج نشان میدهد با افزایش فشار و افزایش نسبت رقیق سازی غلظت CH و غلظت NO کاهش یافته و سپس تاثیر رقیق ساز را بر دمای شعله و سرعت شعله بررسی کردیم و متوجه شدیم با افزایش نسبت رقیق سازی، حداکثر دمای شعله و میزان تشکیل NO<sub>x</sub> روند کاهشی را در پیش دارد، که علت این روند ظرفیت حرارتی بالای CO<sub>2</sub> می باشد که در نسبت های رقیق سازی بالاتر گرمای بیشتری را جذب کرده و باعث کاهش بیشتر حداکثر دمای شعله شده و در نتیجه انتشار آلاینده ها نیز کاهش می یابد.

واژه های کلیدی: رقیق ساز، آلاینده، بررسی عددی، متان، فشار

### ۱- مقدمه

احتراق سوخت های فسیلی منجر به آلودگی قابل ملاحظه ای شده است و یکی از عوامل اصلی گرم شدن زمین محسوب می شود که دلیل این امر انتشار آلاینده هایی از قبیل CO<sub>2</sub>, SO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub> و غیره است [۱]. هنگامی که سوخت های فسیلی از قبیل گاز طبیعی یا نفت و ترکیبات مشتق شده از آنها در هوا می سوزند، محصولات اکسیداسیون شامل H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub> هستند، به علاوه مولکول نیتروژن موجود در هوا با برخی از مولکول های اکسیژن موجود در آن واکنش داده و اکسیدهای نیتروژن شکل می گیرند [2]. اکسید های نیتروژن شامل اکسید نیتریک NO، دی اکسید نیتروژن NO<sub>2</sub> و اکسید نیتروس N<sub>2</sub>O هستند که NO و NO<sub>2</sub> به عنوان NO<sub>x</sub> شناخته می شوند [3]. NO تولید شده از مولکول نیتروژن و اکسیژن موجود در هوا، NO گرمایی (زلدوویچ) و NO تولید شده از مولکول نیتروژن موجود در سوخت، NO سوخت نامیده می شود. غلظت NO در نزدیکی ناحیه شعله برای سوخت های هیدروکربنی وابستگی کمتری به دما دارد و رادیکال هایی مانند O و OH به تشکیل NO کمک می کنند. بنابراین، بخشی از NO علی رغم کنترل دمای شعله و غلظت اکسیژن شکل میگیرد که به آن NO فوری [Promp] گفته می شود [4,5]. گاز طبیعی به عنوان سوختی که احتراق آن انتشار آلاینده کمتری را در پی دارد، از تمیز ترین سوخت ها محسوب می شود (به دلیل کسر مولی پایین تر کربن نسبت به هیدروژن، که دلیل این امر ساختار شیمیایی ساده و عدم مشکل تبخیر سوخت است).

عمل رقیق سازی به عنوان یک خط مشی جهت دست یابی به انتشار  $NO_x$  کمتر در بسیاری از مقالات مورد بررسی و آزمایش قرار گرفته است. این اصل بر گسترش حدود اشتعال پذیری به سمت شرایط رقیق سوز استوار است که کاهش قابل توجه اکسید های نیتروژن را به همراه دارد [6,8]. احتراق رقیق سوز پیش امیخته بسیار مورد توجه قرار گرفته است، زیرا باعث پایین آمدن دمای شعله و در نتیجه انتشار  $NO_x$  کمتر می شود، هرچند در نزدیکی حدود اشتعال پذیری رقیق ساز، پایداری شعله کم شده و پدیده خاموشی ممکن است اتفاق بیفتد. به علاوه شعله های رقیق ساز ممکن است منجر به مشکلاتی از قبیل خاموشی، بازده احتراق پایین و غلظت های بالاتر مونوکسید کربن ( $CO$ ) شوند، که یک راه حل عملی برای غلبه بر این مشکلات، افزودن سوخت های واکنش پذیر تر مانند هیدروژن است [9-11].

از بین اکسید های مختلف نیتروژن،  $NO$ ،  $NO_2$ ،  $(NO_x)$ ، به لحاظ اثرات سوء بر سلامت انسان و  $N_2O$  به عنوان گاز گلخانه ای در گرمایش زمین اهمیت دارند.  $NO_x$  ابتدا به صورت  $NO$  در جریان احتراق از ترکیب نیتروژن و اکسیژن هوا در دمای بالا و به ویژه در موتورهای احتراق داخلی و کوره ها تشکیل می شود و پس از ورود به هوا به سرعت تبدیل به  $NO_2$  می شود [12] چون کوره های صنعتی (از قبیل دیگ های بخار نیروگاهی) اغلب تحت شرایط پر از اکسیژن (محدوده نسبت های هم ارزی 0.8 تا 0.9) کار میکنند، شرایطی برای تولید  $NO$  فوری فراهم نبوده و به همین دلیل است که سوخت های گازی حاوی نیتروژن نیستند،  $NO$  نیز تشکیل نمی شود و در نتیجه  $NO$  گرمایی (زلدوویچ) تولید می شود [13]. در رابطه (۱) واکنش های تشکیل  $NO$  زلدوویچ دیده می شود:



این واکنش ها به عنوان واکنش های تشکیل  $NO$  گرمایی نیز شناخته میشوند، زیرا واکنش های اول به دلیل پیوند سه گانه قوی در مولکول  $N_2$  دارای انرژی فعالسازی بسیار بالایی است، بنابر این فقط در دماهای بالا واکنش سریع انجام می گیرد، در غیر اینصورت واکنش اول، محدود کننده تشکیل  $NO$  گرمایی است. برای محاسبه  $NO$  گرمایی از رابطه (۲) استفاده می شود [۱۳].

$$[NO] = K_1 \exp(-K_2/T) [N_2][O_2]^{1/2} \cdot t \quad (2)$$

در این رابطه  $K_1$  و  $K_2$  ثابت های سینتیکی واکنش،  $t$  زمان و  $T$  دماست، همچنین کروسه نشان دهنده غلظت است. به دلیل اینکه دمای بالای شعله سبب شکستن پیوند سه گانه مولکول نیتروژن موجود در هوا و ترکیب آن با اکسیژن موجود در آن می شود تولید  $NO$  گرمایی به شدت به تغییرات دما حساس است. در معادله تشکیل  $NO$  دما به صورت تابعی نمایی نقش دارد و از آنجا که در دماهای بالاتر از 1700K به ازای هر ۴۰ درجه افزایش دما، تولید  $NO$  دو برابر می شود و همچنین به دلیل انرژی فعالسازی بالای سازو کار تشکیل  $NO$ ، اگر روشی موجب کاهش دمای شعله شود، عاملی موثر جهت کاهش تشکیل  $NO_x$  است [14,15].

رقیق سازی روشی است که با افزودن یک رقیق کننده که ظرفیت بالایی دارد، ظرفیت گرمایی مخلوط را زیاد کرده و با افزایش توانایی جذب گرما از کوره دمای محفظه احتراق را کاهش می دهد و در نتیجه باعث کاهش انتشار الاینده  $NO_x$  میشود [۱۶]. برخی از رقیق کننده هایی که سبب رقیق سازی مخلوط سوخت و هوا و کاهش غلظت اکسیژن می شود عبارتند از  $H_2O$ ،  $N_2$ ،  $CO_2$  که ظرفیت گرمایی بالای این گونه ها سبب افزایش ظرفیت گرمایی مخلوط، جذب گرمای ناشی از احتراق و در نتیجه کاهش دمای شعله و  $NO_x$  تولیدی می شود [۱۷]. رقیق کننده های دیگر مورد استفاده عبارتند از  $H_2$  و  $He, Ar, CO$  و حتی  $NO$  که هر یک به نحوی منجر به کاهش الاینده  $NO_x$  می شوند [1,6,7].

این پژوهش به بررسی عددی تاثیر رقیق ساز  $CO_2$  بر روی شعله متان هوا پرداخته و برای شبیه سازی از کد PREMIX نرم افزار CHEMKIN II استفاده کردیم، اثرات افزایش فشار رانیز بررسی کردیم و در انتها اثرات آن روی تولید آلاینده ها را بررسی کردیم.

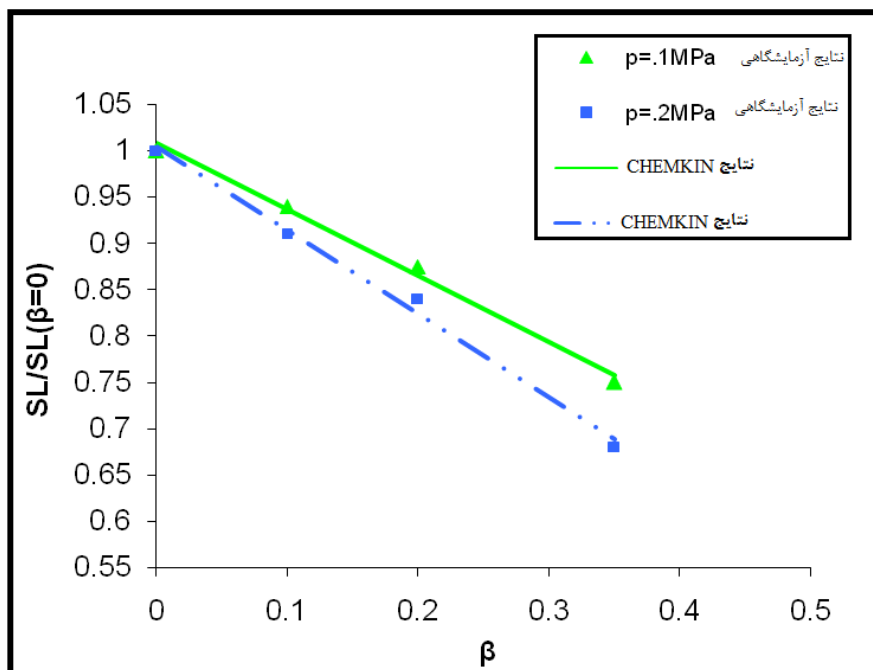
## ۲- روش محاسباتی

شبیه سازی عددی شعله ها با استفاده از شرایط ثابت و کد PREMIX انجام شده است. از CHEMKIN II به عنوان یک پیش پردازنده استفاده کردیم که برای تعیین خواص ترمودینامیکی و جزئیات دیگر از داده های کی و همکارانش (Kee) استفاده کردیم [18,19]. برای شبیه سازی از جزئیات مکانیزم های شیمیایی در GRI-Mech 3.0 [20] که شامل ۳۲۵ واکنش ۵۳ گونه است استفاده کردیم.

## ۳- نتایج و بحث ها

### ۳-۱- تاثیر رقیق ساز بر سرعت شعله

در شکل ۱ تاثیر رقیق ساز  $CO_2$  بر روی سرعت شعله متان- هوا را در نسبت رقیق سازی های متفاوت ( $\beta$ )، و نسبت هم ارزی ۰.۸۸، که با نتایج آزمایشگاهی کریستین چاوو و همکارانش (Christian Chauveu) [21] مقایسه شده است.



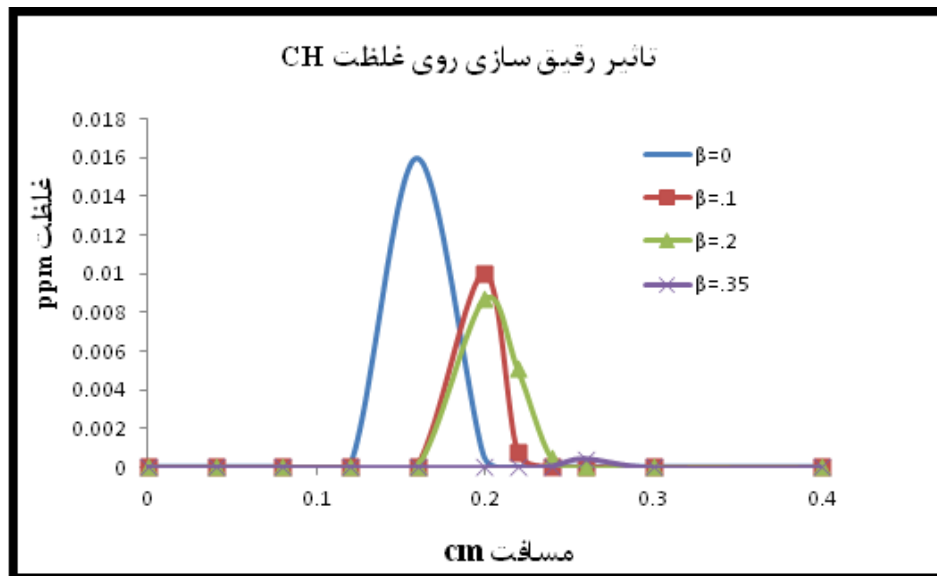
شکل ۱- تاثیر رقیق ساز  $CO_2$  بر سرعت شعله متان- هوا در نسبت رقیق سازی های متفاوت و نسبت هم ارزی 0.88

نتایج شبیه سازی عددی با نتایج آزمایشگاهی مطابقت خوبی دارد. سرعت شعله را در دو فشار متفاوت و در نسبت رقیق سازی های متفاوت رسم کردیم که مشاهده می کنیم با افزایش نسبت رقیق سازی سرعت شعله کاهش می یابد.

### ۳-۲- تاثیر رقیق سازی روی تولید CH

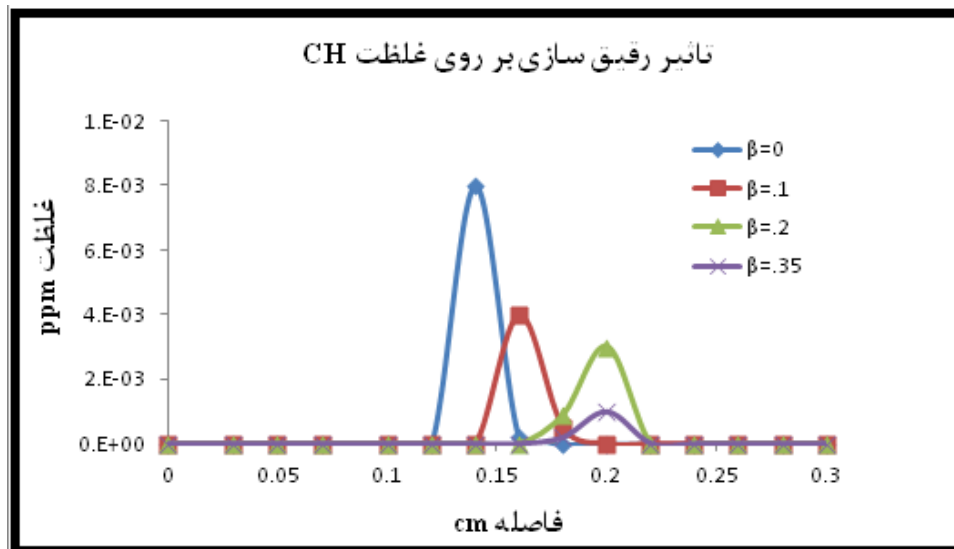
در شکل زیر تاثیر رقیق ساز  $CO_2$  روی غلظت CH در نسبت رقیق سازی های متفاوت را در فشار یک اتمسفر نشان می دهد. نتایج نشان می دهد با افزایش نسبت رقیق سازی، غلظت CH رو به کاهش است، به طوری که در نسبت های رقیق سازی بالاتر،  $\beta=0.35$  غلظت CH رو به صفر است. از طرفی در اشکال ۲، ۳ و ۴ مشاهده می شود که غلظت CH در اثر افزایش فشار رو به کاهش است.

محاسباتی که توسط GRI-Mech 3.0 انجام شد، اساسا پیش بینی خوبی برای غلظت های اندازه گیری شده اکسید نیتریک برای تمام فشار های مورد مطالعه در اینجا انجام می دهد. بخاطر این که محاسبات، کسرهای مولی اندازه گیری شده CH را هم پیش بینی می کند، اختلافات بدست آمده در کسر مولی NO، با بهبود پیش بینی CH، ممکن است کمتر شود. پیش بینی بهتر غلظت CH در این شعله ها، تطابق بین پروفیل های NO را بهبود می بخشد. قدرت پیش گویی GRI-Mech 3.0 برای تولید NO ممکن است با تنظیم تولید CH بهبود یابد.



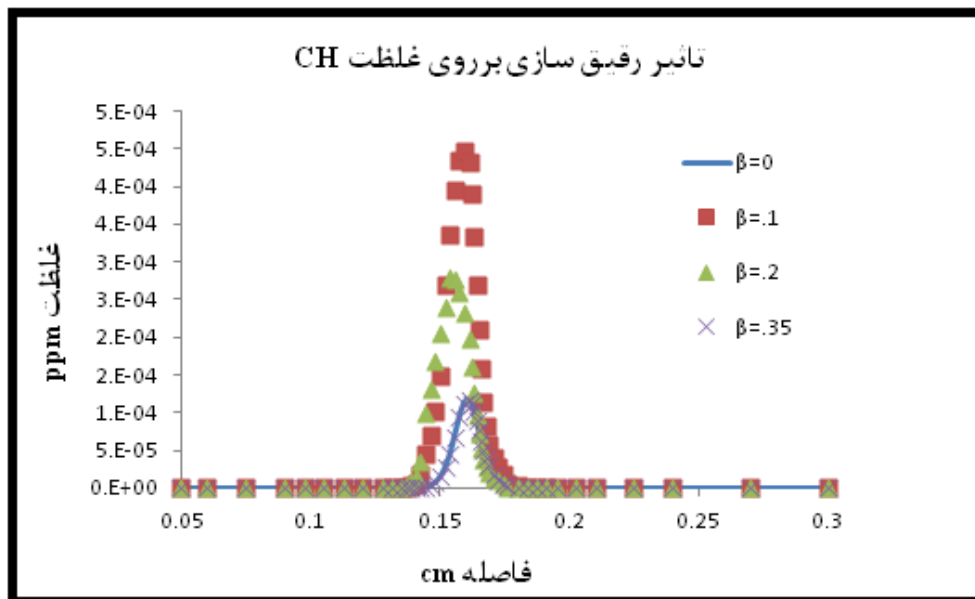
شکل ۲- تاثیر رقیق ساز  $CO_2$  روی غلظت CH در نسبت رقیق سازی های متفاوت در فشار ۱ اتمسفر

شکل ۳ تاثیر رقیق ساز  $CO_2$  روی غلظت CH در نسبت رقیق سازی های متفاوت در فشار ۲ اتمسفر را نشان می دهد. مشاهده می کنیم که با افزایش فشار و افزایش نسبت رقیق سازی، غلظت CH کاهش می یابد.



شکل ۳- تأثیر رقیق ساز  $CO_2$  روی غلظت CH در نسبت رقیق سازی های متفاوت در فشار ۲ اتمسفر

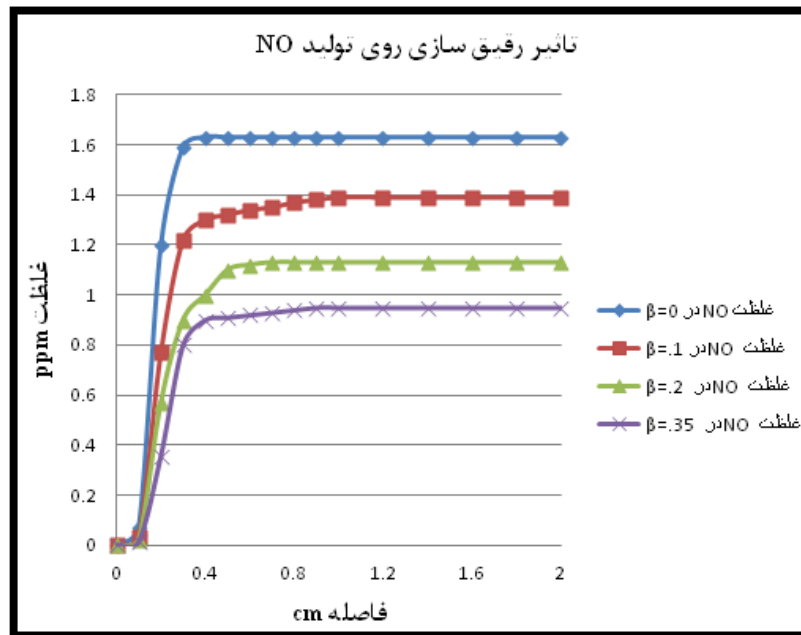
شکل ۴ نیز روند قابل پیش بینی را طی کرده و همانطور که انتظار داشتیم، با افزایش نسبت رقیق سازی و افزایش فشار غلظت CH رو به کاهش است.



شکل ۴- تأثیر رقیق ساز  $CO_2$  روی غلظت CH در نسبت رقیق سازی های متفاوت در فشار ۵ اتمسفر

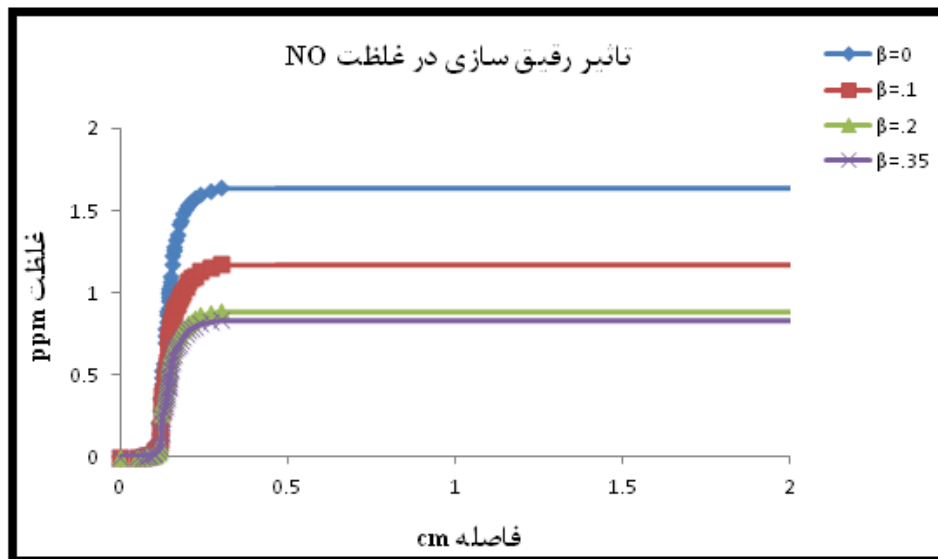
### ۳-۳- تأثیر رقیق سازی روی تولید NO

در شکل ۵ روند تاثیرات رقیق سازی روی تولید NO بررسی شده است. این کار در نسبت رقیق سازی های متفاوت و فشار های متفاوت انجام شده است. نتایج حاکی از آن است که با افزایش نسبت رقیق سازی و افزایش فشار غلظت NO رو به کاهش است.



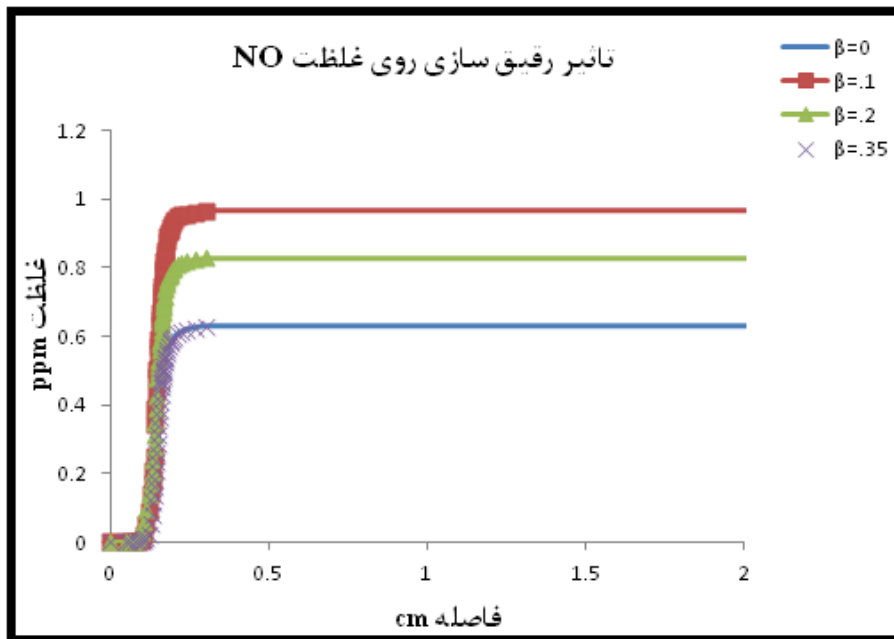
شکل ۵- تأثیر رقیق سازی  $CO_2$  روی غلظت NO در نسبت رقیق سازی های متفاوت در فشار ۱ اتمسفر

در فشار ۲ اتمسفر تغییرات غلظت را برای NO بر حسب فاصله در شکل ۶ رسم کردیم. نتایج با پیش بینی ها مطابق بوده و روند کاهشی را دارد.



شکل ۶- تأثیر رقیق سازی  $CO_2$  روی غلظت NO در نسبت رقیق سازی های متفاوت در فشار ۲ اتمسفر

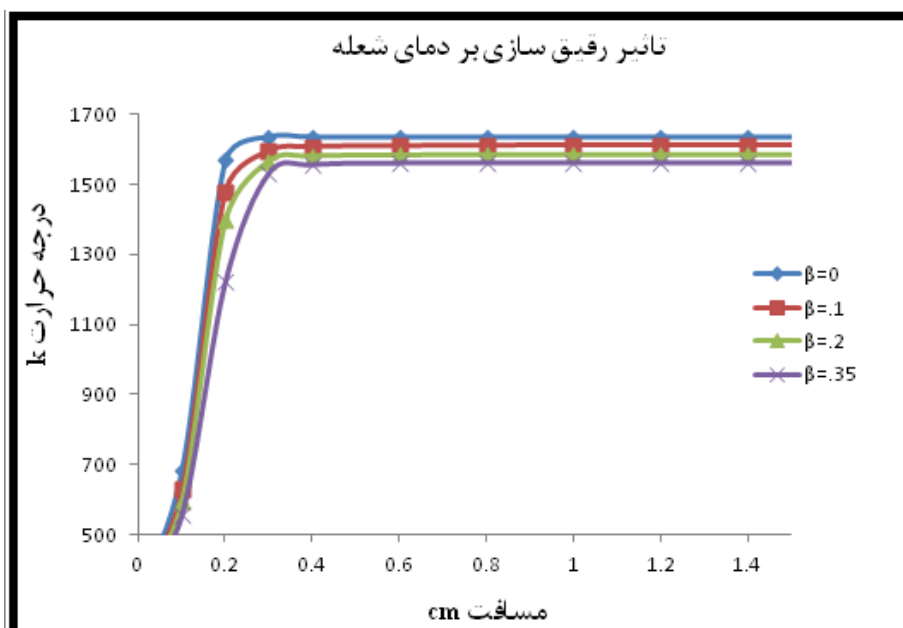
با افزایش فشار به ۵ اتمسفر غلظت NO همچنان با افزایش نسبت رقیق سازی کاهش می یابد. این تغییرات را در شکل ۷ می توانید مشاهده کنید.



شکل ۷- تأثیر رقیق ساز  $CO_2$  روی غلظت NO در نسبت رقیق سازی های متفاوت در فشار ۵ اتمسفر

#### ۳-۴- تأثیر افزایش رقیق ساز بر دمای شعله

در شکل ۸، با افزایش نسبت رقیق سازی، حداکثر دمای شعله روند کاهشی داشته. در بررسی های انجام شده مشاهده کردیم که میزان تشکیل  $NO_x$  روند کاهشی را در پیش دارد، که علت این روند ظرفیت حرارتی بالای  $CO_2$  می باشد، که در نسبت های رقیق سازی بالاتر گرمای بیشتری را جذب کرده و باعث کاهش بیشتر حداکثر دمای شعله شده و در نتیجه انتشار آلاینده ها نیز کاهش می یابد.



شکل ۸- تأثیر رقیق ساز  $CO_2$  روی دمای شعله در نسبت رقیق سازی های متفاوت

در شکل ۸ حداکثر دما از  $1700\text{ K}$  کمتر است و

## نتیجه گیری

یک مطالعه عددی به منظور بررسی رفتار رقیق ساز  $\text{CO}_2$  بروی شعله های ترکیب متان-هوا انجام گرفت. نتایج حاکی از آن بود که با افزایش نسبت رقیق سازی، حداکثر دمای شعله روند کاهشی داشته، اثر رقیق ساز را روی سرعت شعله بررسی کردیم و مشاهده کردیم که با افزایش نسبت رقیق سازی سرعت شعله کاهش یافته که نتایج خود را با داده های آزمایشگاهی کریستین چاوو و همکارانش (Christian Chauveau) مقایسه کردیم که مطابقت خوبی مشاهده شد. در بررسی های انجام شده مشاهده کردیم که میزان تشکیل  $\text{NO}_x$  روند کاهشی را در پیش دارد، که علت این روند ظرفیت حرارتی بالای  $\text{CO}_2$  می باشد، که در نسبت های رقیق سازی بالاتر گرمای بیشتری را جذب کرده و باعث کاهش بیشتر حداکثر دمای شعله شده و در نتیجه انتشار آلاینده ها نیز کاهش می یابد.

## مراجع

1. Bell, S. R., and Gupta, M., "Extinsion of The Lean Operating Limit For Natural Gas Fueling of a Spark Ignited Engine Using Hydrogen Blending," *Combustion Science and Technology*, 123, pp. 23-48, 1997.
2. Schefer, R. W., Wicksall, D. M., and Aggarwal, S. K., "Combustion of Hydrogen-Enriched Methane in a Lean Premixed Swil-Stablized Burner," *Proc. of the 29<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion*, pp. 843-851, 2002.
3. Hill, S. C., and Smoot, L. D., "Modelling of Nitrogen Oxides Formation and Destruction in Combustion System", *Prog. Energy Combustion Science*, 26, pp. 417-458, 2000.
4. Zeldovich, Y. A., *Oxidation of Nitrogen in Combustion*, Academy of Sciences of USSR, Institute of Chemical Physics, Moscow-Leningrad, 1947.
5. Pershing, D. W., and Wendt, J. O. L., "Relative Contributions of Volatile Nitrogen and Char Nitrogen to  $\text{NO}_x$  Emissions from Pulverized Coal Flames," *Ind. Eng. Chem. Proc. Design and Dev.*, 18, NO. 60, 1979.
6. Ren, J. Y., Qin, W., Egolfopoulos, F. N., and Tsotsis, T. T., "Strain-Rate Effects on Hydrogen-Enhanced Lean Premixed Combustion," *Combustion and Flame*, 124, pp. 717-720, 2001.
7. Rortveit, G. J., Zepfer, K., Skreiberg, O., Fossum, M., and Hustad, J. E., "A Comparision of Low- $\text{NO}_x$  Burners For Combustion of Methane and Hydrogen Mixtures," *Proc. of the Combustion Institute*, 29, pp. 1123-1129, 2002.
8. Ghoniem, A. F., Annaswamy, A., Park, S., and Sobhani, Z. C., "Stability And Emissions Control Using Air Injection And  $\text{H}_2$  Addition in Premixed Combustion," *Proc. of the Combustion Institute*, 30, NO. 2, pp. 1765-1773, 2005.
9. Yamaoka, I., and Tsuji, H., "Anomalous Behavior of Methane-Air and Methane-Hydrogen-Air Flames Diluted with Nitrogen in a Stagnation Flow," *Combustion Inst., Pittsburgh*, pp. 145-152, 1992.
10. Wierzba, I., and Ale, B. B., "Rich Flammability Limits of Fuel Mixtures Involving Hydrogen at Elevated Tempratures," *International Journal of Hydrogen Energy*, 25, pp. 75-80, 2000.
11. Jackson, G. S., Sai, R., Plaia, J. M., Boggs, C. M., and Kiger, K. T., "Influence of  $\text{H}_2$  on Response of Lean Premixed  $\text{CH}_4$  Flames to High Strained Flows," *Combustion and Flame*, 132, pp. 503-511, 2003.
12. Liuzzo, G., Verdone, N., and Bravi, M., "The Benefits of Flue Gas Recirculation in Waste Incineration," *waste management*, 27, pp. 106-116, 2007.
13. Warnats, J., Mass, U., and Dibble, R. W., *Combustion*, Springer, 2000.
14. Lazic, L., Varga, A., and Kizek, J., "An Experimental Study of the Influence of FGR on  $\text{NO}_x$  Formation," *Material in Technology*, 38, pp. 31-38, 2004.
15. Littlejohn, D., Majeski A. J., Tonse, S., and Castaldini, C., "Laboratory Investigation of an Ultralow  $\text{NO}_x$  Premixed Combustion Concept For Industrial Boilers," *Proc. of The Combustion Institute*, 29, pp. 1115-1121, 2002.
16. Ho keun kim, and Yongomo kim, "NO Reduction in 0.03-0.2 MW Oxy-Fuel Combustor using Flue Gas Recirculation Technology," *Proceedings of the Combustion Institute*, 31, pp. 3377-3387, 2007.
17. Cho, E. S. and Chung, S. H., "Characteristics of  $\text{NO}_x$  Emission with Flue Gas Dilution in Air and Fuel Sides," *KSME* 12, pp. 2303-2309, 2004.



18. R.J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M.E. Coltrin, J.A. Miller, A FORTRAN Computer Code Package for the Evaluation of Gas-phase, Multicomponent Transport Properties, Rept. SAND86-8246, Sandia National Labs., Albuquerque, NM, 1992.
19. R.J. Kee, F.M. Rupley, J.A. Miller, The CHEMKIN Thermodynamic Data Base, Rept. SAND87-8215B, Sandia National Labs., Albuquerque, NM, 1992.
20. D.M.G. Gregory, P. Smith, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr., Vitali V. Lissianski, and Zhiwei Qin. <[http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)>.
21. Ce'cile Cohe, Christian Chauveau, Iskender Go'kalp, Dilek Funda Kurtulus, "CO2 addition and pressure effects on laminar and turbulent lean premixed CH4 air flames", Proceedings of the Combustion Institute 32 (2009) 1803-1810.