

تحلیل عددی تاثیر فشار و افزودن آب، بر سرعت شعله آرام و انفجار گاز متان

مسعود نادافیان بجزستانی^{۱*}، نیما طینتی^۲، حمید ممهدی هروی^۳

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

(نویسنده مخاطب: ma.nadafian@gmail.com)

چکیده

انفجار گاز سبب ایجاد یک موج انفجاری می گردد که می تواند باعث آسیب رسیدن به تجهیزات شود. در این مقاله، بوسیله کد SENKIN از بسته نرم افزاری CHEMKIN II و با استفاده از ساز و کار شیمیایی احتراق متان- هوا، GRI-Mech3.0 تاثیر افزودن آب و نیز تغییرات فشار بر فرآیند انفجار گاز متان در یک محفظه حجم ثابت، بررسی شده است. همچنین با استفاده از کد PREMIX این نرم افزار، اثر افزودن آب بر سرعت شعله آرام، تحلیل گردیده است. اثر افزودن آب بر روی تغییرات دما و فشار قبل و بعد از فرآیند انفجار گاز متان، و کسر مولی گونه هایی از قبیل CH_4 و O_2 و رادیکالهای آزاد H ، OH و بعضی از آلاینده ها از جمله CO ، CO_2 ، NO و NO_2 مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می دهد که افزودن آب به واکنش دهنده ها سبب به تاخیر افتادن زمان انفجار گاز متان و نیز کاهش پارامترهایی از قبیل فشار و دما می گردد. از طرف دیگر تاثیر دو عامل فشار و افزودن آب با یکدیگر در مقایسه با حالتی که فقط پارامتر فشار تغییر کند، سبب تسریع در فرآیند انفجار گاز متان شده است. همچنین افزودن آب به واکنش دهنده ها سبب کاهش کسرهای مولی گونه های واکنش دهنده و نیز رادیکالهای آزاد و آلاینده ها می گردد.

واژه های کلیدی: انفجار متان - فشار - افزودن آب - تحلیل عددی

۱- مقدمه

فرآیند رقیق سازی واکنش دهنده ها می تواند جهت اهداف مختلف مورد استفاده قرار گیرد که از آن جمله می توان کنترل انتشار آلاینده ها، پایداری شعله و تقویت یا تضعیف واکنش های شیمیایی خاص را نام برد. اضافه نمودن یک رقیق کننده در یک مخلوط واکنشی، تغییرات شاخصی در خصوصیات شعله ایجاد می کند. اضافه نمودن یک رقیق کننده می تواند باعث کاهش غلظت واکنش دهنده ها گردد و با جذب حرارت آزاد شده، دمای شعله را کاهش می دهد [۱].

به طور کلی، انفجار گاز، یک واکنش شیمیایی سریع است و واکنش دهنده ها، گازهای مخلوط شده قابل انفجاری هستند که شامل گازهای احتراق پذیر از قبیل مخلوط متان و هوا می باشند [۲،۳]. فاکتورهای اصلی که بر روی انفجار متان تأثیر گذارند، شامل غلظت واکنش دهنده ها و رادیکال ها می باشند [۴،۵]. بعد از انفجار گاز، یک موج انفجاری در راههای متعلق به یک معدن ممکن است شکل گرفته شود. این موج انفجاری سبب ایجاد خسارت به راهها و تجهیزات معدن و نیز جراحات معدن چیان خواهد شد. بنابراین انفجار گاز مقادیر زیادی از آلاینده ها را تولید خواهد نمود که این خود یکی از عوامل اصلی برای شمار زیادی از تلفات معدن چیان می باشد [۶،۷]. در سالهای اخیر، سینتیک های واکنش انفجار گاز، مورد توجه مطالعات مربوط به انفجار گاز قرار گرفته است [۸،۹].

أه و همکارانش (oh et al.) [۱۰] خصوصیات مختلف انفجار گاز در مجراهای منفذ دار را مورد مطالعه قرار دادند. در این مطالعه، خصوصیات انفجار و رفتار شعله متعلق به انفجار های منفذدار انفجارهای حجم ثابت مطالعه شده بودند. شبکو و همکارانش (shebeko et al.) [۱۱] سرعت های سوخت ها و محدودیت های اشتعال پذیری مخلوط های گازی، گازهای اشتعال

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد مکانیک، گرایش تبدیل انرژی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد مشهد

۲- دانشجوی کارشناسی ارشد مکانیک، گرایش تبدیل انرژی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد مشهد

۳- استادیار گروه مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد مشهد

پذیر (هیدروژن و متان)، اکسید کننده ها (اکسیژن و هوا) و رقیق کننده ها (نیتروژن، آرگون، هلیوم، دی اکسید کربن، بخار آب، آب تحت فشار در یک محفظه فلزی که بوسیله تبخیر آب مافوق گرم بوجود می آید) در دماهای ارتقاء یافته تا 250°C و فشارهای تا ۴MPa را اندازه گیری نمودند.

سازوکارهای واکنش در مطالعات سینماتیک انفجار گاز در مقالاتی که تا کنون ارائه گردیده است، بسیار ساده بوده اند به گونه ای که جزئیات سینماتیک واکنش مربوط به فرآیند انفجار گاز، غیر قابل انعکاس است. تاثیر گونه های میانی یا رادیکالهای آزاد بر روی فرآیند انفجار گاز به ندرت گزارش شده است. علاوه بر این، تاثیر سینماتیک شیمیایی افزودن آب بر روی فرآیند انفجار گاز تا به حال، به خوبی درک نشده است. با توجه به اینکه ساز و کار سینماتیک شیمیایی گاز متان، به خوبی شناخته شده [۱۲] و شبیه سازی سینماتیکی یک واکنش شیمیایی، می تواند سبب حاصل شدن اطلاعات وسیعی در رابطه با آن گردد، در این مقاله، تاثیر سینماتیک شیمیایی افزودن آب بر روی فرآیند انفجار گاز متان با استفاده از ساز و کار شیمیایی تفضیلی، مورد تحلیل قرار گرفته است. رابطه میان کاهش آلاینده ها با افزودن مقادیر مختلف آب، همچنین مورد بحث قرار گرفته است. علاوه بر این، تاثیر همزمان دو عامل افزودن آب و افزایش فشار بر روی زمان انفجار و رفتار گاز متان، پیش از احتراق و پس از آن، بررسی شده است.

۲- روش محاسباتی

در این مقاله، یک بسته نرم افزاری با ساختار کامپیوتری پیشرفته به نام CHEMKIN II [۱۳] مورد استفاده قرار گرفته است تا اتصالی بین یک مکانیزم واکنش شیمیایی با فاز گازی با شبیه سازی عددی ایجاد گردد. مزیت های جانبی کار حاضر، ظرفیت ایجاد شده جهت محاسبه غلظت های رادیکالهای آزاد به همان خوبی گونه های پایدار، از طریق داده های ورودی مربوط به گونه ها، می باشد. جهت استخراج داده های مختلف از دو کد SENKIN [۱۴] و PREMIX [۱۵] استفاده شده است.

SENKIN [۱۴] یک برنامه کامپیوتری با کد فرترن می باشد که رفتار یک مخلوط گازی همگن در یک سیستم بسته را در بازه های زمانی مختلف، به صورت عددی مدلسازی می کند. در کار حاضر، فرآیند انفجار گاز در محفظه ی با حجم ثابت بوسیله کد SENKIN [۱۴] از بسته نرم افزاری CHEMKIN II [۱۳] و با استفاده از GRI-Mech3.0 [۱۶] مورد محاسبه قرار گرفته است.

کد PREMIX [۱۵] یک برنامه کامپیوتری به زبان فرترن است که با استفاده از آن می توان تغییرات فشار، دما، غلظت گونه های پایدار و رادیکالهای آزاد و مهمتر از همه، سرعت شعله را به ازای مقادیر مختلف فاصله محوری نسبت به مرکز شعله، محاسبه نمود. در این مقاله با استفاده از این کد، تغییرات سرعت شعله بررسی شده است.

GRI-Mech، یک مکانیزم واکنش شیمیایی تفضیلی است که برای احتراق متان، بهینه شده است. GRI-Mech3.0 [۱۶] شامل ۳۲۵ واکنش شیمیایی ابتدایی است که عبارات ضریب رشد و پارامترهای ترمو- شیمیایی برای ۵۳ گونه به آنها پیوند داده شده است. محدوده های قابل استفاده در GRI-Mech3.0 [۱۶]، برای دما بین ۲۵۰۰-۱۰۰۰ K، ۱۰ Torr-۱۰ atm در فشار و ۵-۱۰ در نسبت هم ارزی می باشد. مکانیزم GRI-Mech3.0 [۱۶]، برای مقدار زیادی از مقادیر آزمایشگاهی شامل متان، اتان، منواکسید کربن و هیدروژن معتبر می باشد [۱۷].

در محاسبات زیر، کسر مولی آب در گاز مخلوط شده ۰٪، ۵٪، ۱۰٪ و ۲۰٪ می باشد. دمای اولیه و فشار به ترتیب ۱۳۰۰k و ۱atm می باشند. زمان انفجار برآورد شده، در برابر دمای اولیه و فشار که بسیار بالا هستند، خیلی کوتاه می باشد. اگر دمای اولیه خیلی پایین باشد (کمتر از ۱۰۰۰k)، گاز مخلوط شده منفجر نخواهد شد. کسرهای مولی واکنش دهنده ها برای مخلوط گاز، محاسبه گردیده و در جدول ۱ نشان داده شده است.

جدول ۱) کسرهای مولی واکنش دهنده ها برای مخلوط متان / هوا / آب

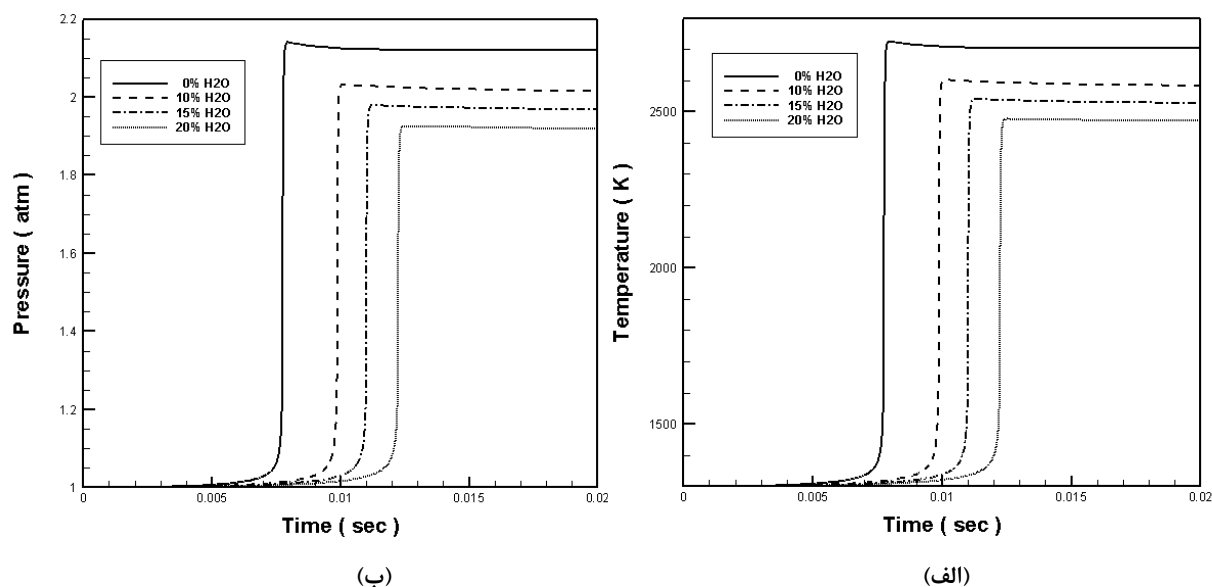
| شماره | کسر مولی متان | کسر مولی اکسیژن | کسر مولی نیتروژن | کسر مولی آب |
|-------|---------------|-----------------|------------------|-------------|
| ۱ | ۰/۰۷ | ۰/۲۲ | ۰/۷۱ | ۰/۰ |
| ۲ | ۰/۰۶۳ | ۰/۱۹۸ | ۰/۶۳۹ | ۰/۱ |
| ۳ | ۰/۰۵۹۵ | ۰/۱۸۷ | ۰/۶۰۳۵ | ۰/۱۵ |
| ۴ | ۰/۰۵۶ | ۰/۱۷۶ | ۰/۵۶۸ | ۰/۲ |

۳- نتایج و بحث

نمودارهای این قسمت شامل تغییرات پروفیل مربوط به کسرهای مولی گونه های واکنش دهنده از قبیل CH_4 و O_2 و نیز برخی از گونه های میانی فعال از قبیل H و O و OH و آلاینده هایی از قبیل CO و CO_2 و NO و NO_2 می باشد. لازم به ذکر است که تمام حالات عنوان شده، در یک محفظه حجم ثابت و در حالتی است که کسرهای مولی آب در واکنش دهنده ها طبق مقادیر جدول ۱ تغییر می کنند. همچنین علاوه بر این موارد، اثرات تغییرات فشار از ۱ atm تا ۳ atm بر روی انفجار گاز متان در دو حالت خشک و نیز حالت افزودن ۲۰٪ آب، شبیه سازی شده است. همچنین تغییرات سرعت شعله آرام گاز متان در نسبت های هم ارزی و درصد های مختلف آب، مورد بررسی قرار گرفته است.

۳-۱- تحلیل پروفیل های فشار و دما

نمودارهای ۱- الف و ۱- ب تغییرات دما و فشار، قبل و بعد از فرآیند انفجار گاز متان، در بازه های زمانی مختلف را نشان می دهند.

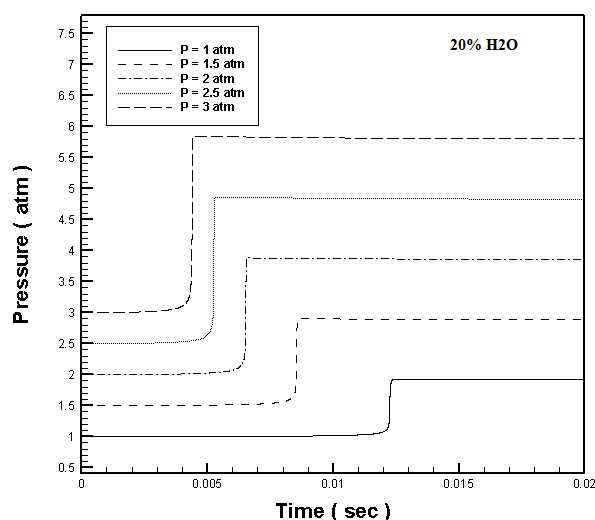


نمودار ۱- تغییرات پروفیل های الف) دما و ب) فشار، نسبت به زمان در حالت های مختلف افزودن آب

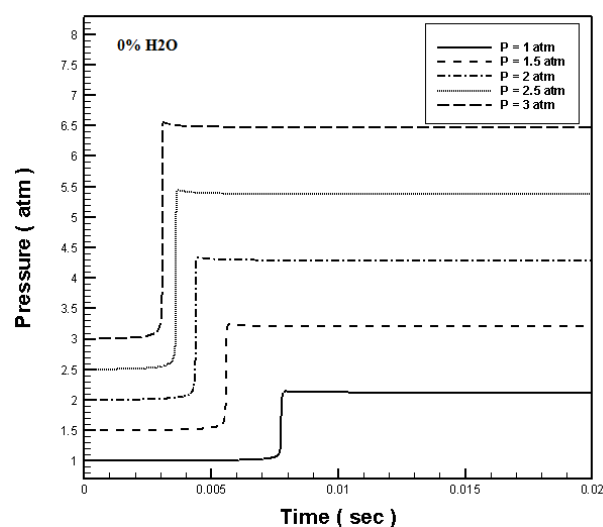
از آنجا که ضریب رشد واکنش در شکل آرینیوس، وابستگی زیادی به دما دارد، دما باید روی فرآیند واکنش شیمیایی، یک تاثیر بزرگ داشته باشد. در نمودار ۱- الف، دما بعد از انفجار گاز متان، که برابر با 2700 K بدون کسر آب می باشد، به 2600 K با کسر آب ۱۰٪ در مخلوط گاز، کاهش یافته است. به علاوه، در مقایسه دو حالت کسر آب ۱۰٪، دما در حدود 220 K با کسر آب ۲۰٪، در مخلوط گاز، تقلیل پیدا کرده است.

در نمودار ۱- ب فشار بعد از انفجار بدون کسر آب، $2/15\text{ atm}$ می باشد و با افزایش یافتن آب در گاز مخلوط شده، این مقدار کاهش می یابد. در مقایسه با حالتی که هیچ کسر آبی در گاز مخلوط شده وجود نداشته است، فشار تا $0/15\text{ atm}$ با اضافه کردن ۱۰٪ کسر آب در گاز مخلوط شده کاهش یافته و به مقدار 2 atm رسیده است. همچنین فشار $0/1\text{ atm}$ و وقتی که کسر آب از ۱۰٪ به ۲۰٪ رسیده است، به مقدار $1/9\text{ atm}$ تغییر نموده است. با توجه به نمودار ۱ می توان دریافت که اضافه نمودن آب سبب تاخیر در فرآیند انفجار گاز متان می گردد. به عنوان مثال در حالتی که هیچ کسر آبی نداریم، زمان انفجار $0/0075\text{ s}$ و در حالتی که ۲۰٪ آب در واکنش دهنده ها داریم زمان انفجار $0/0125\text{ s}$ است که این زمان به میزان $0/005\text{ s}$ طولانی تر شده است.

نمودار ۲، تغییرات پروفیل فشار را در دو حالتی که واکنش دهنده ها بدون آب اضافه و هنگامی که ۲۰٪ آب در واکنش دهنده ها است، را نشان می دهد.



(ب)



(الف)

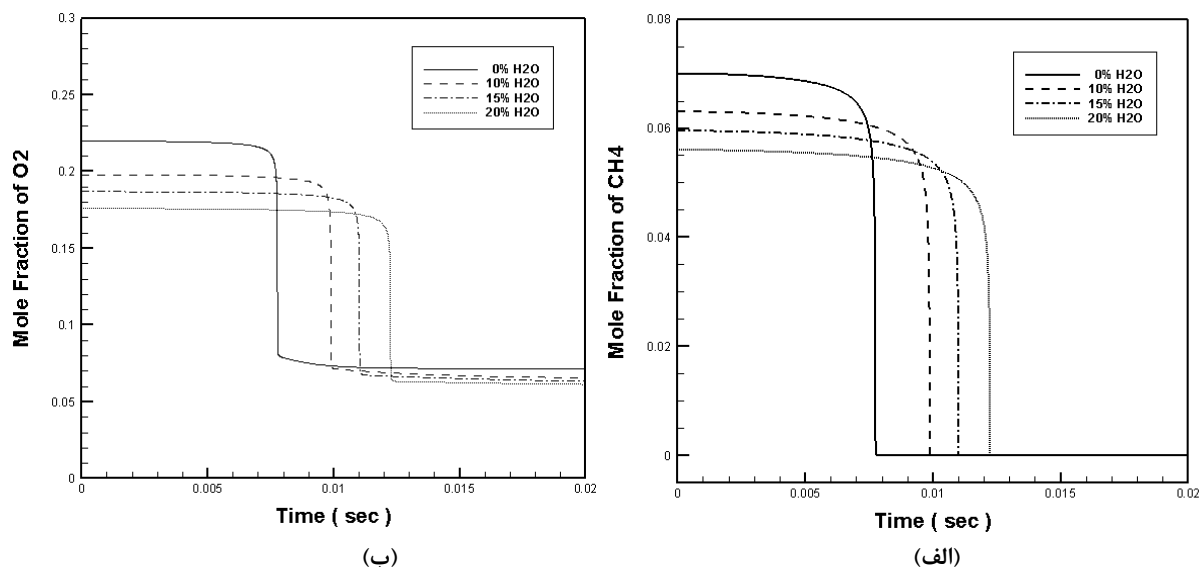
نمودار ۲- تغییرات پروفیل فشار در بازه های زمانی مختلف الف) بدون آب در واکنش دهنده ها و ب) به ازای ۲۰٪ آب در واکنش دهنده ها در فشارهای $1, 1/5, 2, 2/5, 3\text{ atm}$

همانطور که از هر دو نمودار ۲- الف و ۲- ب مشخص است، افزایش فشار در هر دو حالت سبب تسریع در فرآیند انفجار گاز متان می گردد. در حالتی که آب در محصولات نیست و فشار اولیه 1 atm است، پس از انفجار، بیشترین مقدار فشار به $2/1\text{ atm}$ رسیده است و این در حالی است که اگر در واکنش دهنده ها آب باشد مقدار بیشترین فشار پس از انفجار به $1/9\text{ atm}$ خواهد رسید که یک کاهش $0/2\text{ atm}$ به چشم می خورد. در حالتی که ۱۰٪ آب در واکنش دهنده ها وجود دارد، اختلاف حداکثر فشار پس از احتراق با فشارهای اولیه 1 atm و 3 atm برابر با $4/4\text{ atm}$ می گردد و این در حالی است که برای حالتی که ۲۰٪ آب در واکنش دهنده ها داریم این میزان اختلاف به $3/9\text{ atm}$ رسیده است. همچنین وقتی که اثرات دو پارامتر فشار و اضافه نمودن آب با یکدیگر در نظر گرفته شوند، تاثیر آن بر روی کاهش زمان انفجار گاز متان بیشتر از حالتی است که فقط اثرات پارامتر

فشار در نظر گرفته شده است، به طوریکه در حالتی که اثرات هر دو با هم در نظر گرفته شوند زمان انفجار در بازه ی فشار ۱atm تا ۳atm به میزان ۰/۰۰۷۷s کاهش پیدا کرده و این در حالی است که اگر فقط تغییرات فشار در نظر گرفته شود، در این بازه ی فشار، به میزان ۰/۰۰۲۸s کاهش در مقدار زمان انفجار وجود خواهد داشت.

۳-۲- تحلیل پروفیل های کسر مولی گونه های واکنش دهنده ها

نمودار ۳-الف و ۳-ب، تغییرات کسر مولی CH_4 و O_2 در بازه های زمانی مختلف را نشان می دهد.



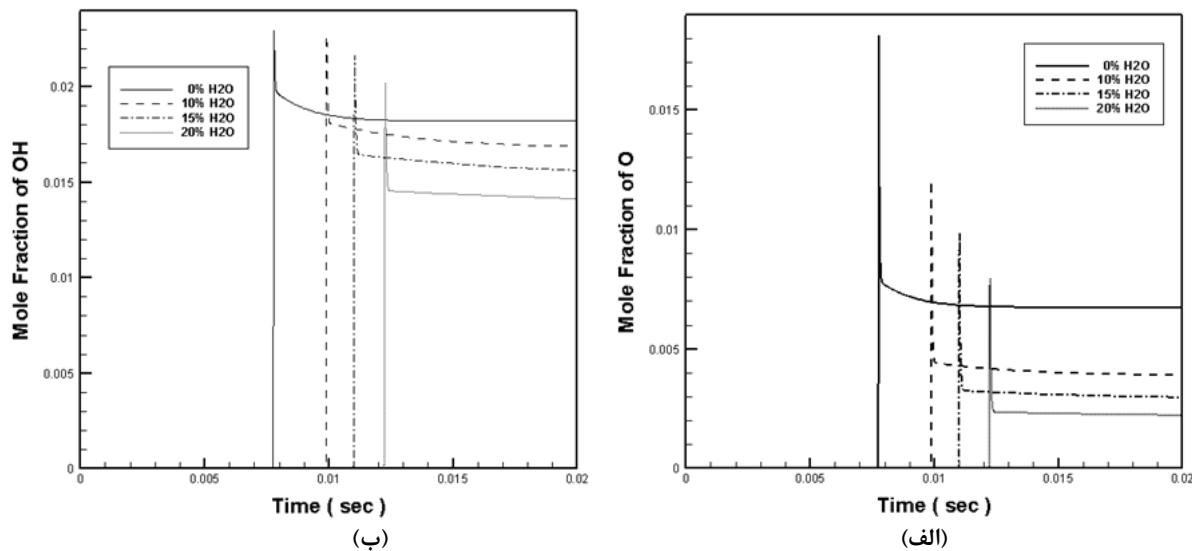
نمودار ۳- تغییرات کسر مولی الف) CH_4 و ب) O_2 نسبت به زمان در فرآیند انفجار گاز متان

کسر مولی CH_4 در طی فرآیند انفجار گاز متان، درحالتی که هیچگونه آبی در واکنش دهنده ها وجود ندارد، سریعاً در بازه زمانی ۰/۰۰۷۵s از شروع واکنش، کاهش پیدا می کند و سپس، بعد از این زمان، به طور کامل مصرف گردیده و مقدار آن به صفر می رسد. (به صورت زمان انفجار عنوان گردیده است). علاوه بر این، افزایش محتوی آب، سبب طولانی تر شدن زمان رسیدن به انفجار گردیده است. زمان انفجار ذکر شده، ۰/۰۱s، ۰/۰۱۱s و ۰/۰۱۲۵s وقتی که کسر آب در گاز مخلوط شده ۱۰٪، ۱۵٪ و ۲۰٪ است، می باشد. افزودن مقادیر مختلف آب به واکنش دهنده ها، منجر به کاهش کسر مولی CH_4 واکنش دهنده و جلوگیری از واکنش شیمیایی شده است. (دمای واکنش دهنده همانطور که در نمودار ۱-الف نشان داده شده است، کاهش یافته است). مطالعات نشان می دهند که از انفجار گاز به طور شاخصی، با اضافه نمودن آب، جلوگیری شده است. بر خلاف کسر مولی CH_4 که در حالت ۰٪ آب، پس از فرآیند انفجار، مقدار آن به صفر می رسد، در نمودار ۲-ب، کسر مولی O_2 در این حالت به مقدار صفر نرسیده است بلکه مقدار آن از ۰/۲۲ در ابتدای شروع واکنش به مقداری برابر با ۰/۰۷، پس از فرآیند انفجار گاز متان، کاهش پیدا کرده است. دلیل این مقدار کسر مولی باقی مانده پس از فرآیند احتراق، می تواند وجود O_2 در قسمت محصولات باشد. این بارزترین تفاوتی است که در مقایسه پروفیل کسرهای مولی CH_4 و O_2 به نظر می رسد.

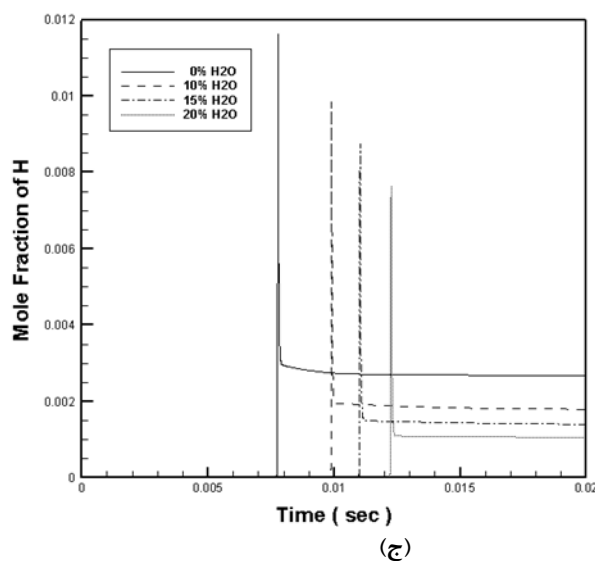
۳-۳- تحلیل پروفیل های کسر مولی رادیکالهای آزاد

پروفیل کسرهای مولی O ، H و OH در نمودار ۴-الف، ۴-ب و ۴-ج نشان داده شده است. رادیکالهای آزاد از قبیل H ، O و OH به علت حضور الکترونها جفت نشده، شدیداً فعال هستند و عمر کمی در طی احتراق دارند. رادیکالهای آزاد همواره تلاش می کنند تا با جفت شدن با سایر رادیکالهای آزاد پیوند های هم ظرفیتی را ایجاد نمایند. واکنش های شاخه زنجیره ای (chain branching) و شاخه پخش (chain-propagation) که بوسیله رادیکالهای آزاد، آغاز می گردند، مهمترین نقش را در واکنش

شیمیایی ایفا می کنند. در یک واکنش شاخه زنجیره ای، تولید دو رادیکال آزاد از طریق مصرف فقط یک رادیکال آزاد در قسمت واکنش دهنده ها، امکان پذیر می باشد.



نمودار ۴ - تغییرات کسر مولی الف (O) و ب (OH) نسبت به زمان در فرآیند انفجار گاز متان



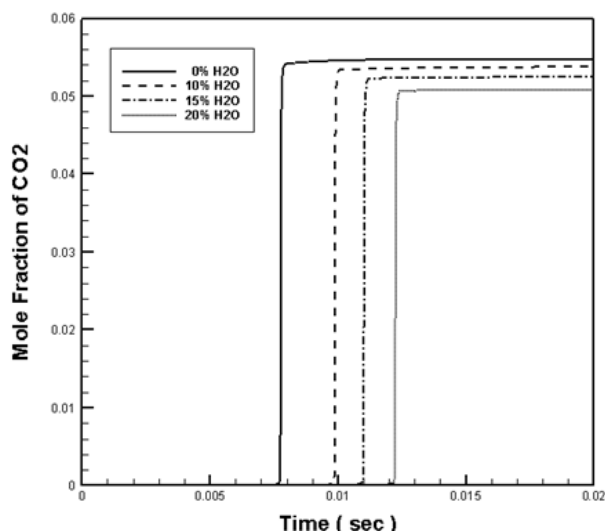
نمودار ۴ - تغییرات کسر مولی ج (H) نسبت به زمان در فرآیند انفجار گاز متان

همانگونه که در نمودار ۴ نشان داده شده است، کسرهای مولی H، OH و O وقتی که مخلوط گاز منفجر می گردد سریعاً افزایش یافته و پس از آن یک کاهش نسبی در تمام گونه ها مشاهده می گردد و این کاهش در مقادیر تا جایی ادامه پیدا می کند که کسر های مولی رادیکالهای آزاد به یک مقدار ثابت برسد. پس از انفجار گاز، بخشی از این رادیکالهای آزاد نابود می گردند و بنابراین غلظت این رادیکالها کاهش می یابند. علاوه بر این، کسرهای مولی H، O و OH با افزودن آب، کاهش می یابند لذا بیشترین میزان فعالیت رادیکالهای آزاد وقتی دیده می شود که واکنش دهنده ها آب نداشته باشند و وقتی که آب اضافه گردد

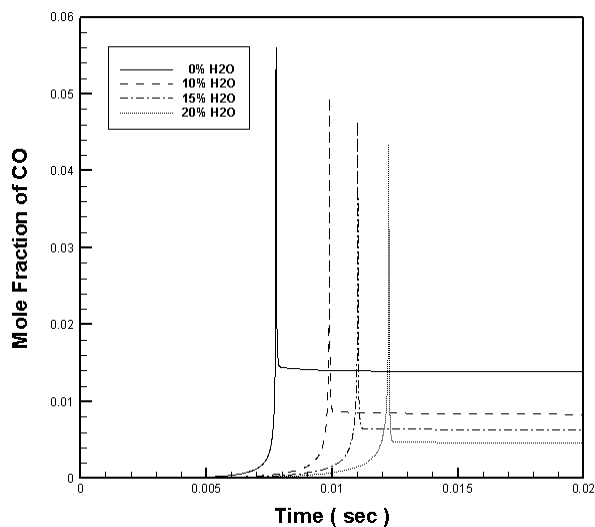
این فعالیتها نیز به تدریج کمتر می شود. کمتر شدن غلظت رادیکالهای آزاد می تواند سبب کند تر شدن فرآیند احتراق نیز گردد.

۳-۴- تحلیل پروفیل های کسر مولی آلاینده ها

بعد از انفجار گاز، بعضی آلاینده ها از قبیل CO، CO₂، NO و NO₂ تولید خواهند شد. کسرهای مولی CO، CO₂، NO و NO₂ در فرآیند انفجار گاز، در نمودارهای ۵ و ۶، ترسیم شده اند.

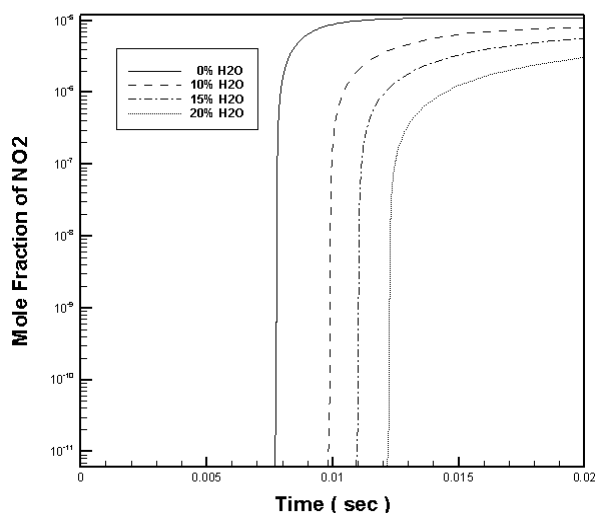


(ب)

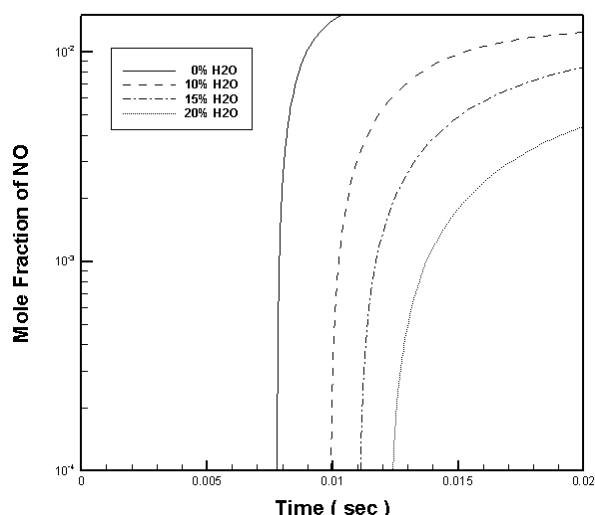


(الف)

نمودار ۵- تغییرات کسر مولی CO (الف) و CO₂ (ب) نسبت به زمان در فرآیند انفجار گاز متان



(ب)



(الف)

نمودار ۶- تغییرات کسر مولی NO (الف) و NO₂ (ب) نسبت به زمان در فرآیند انفجار گاز متان

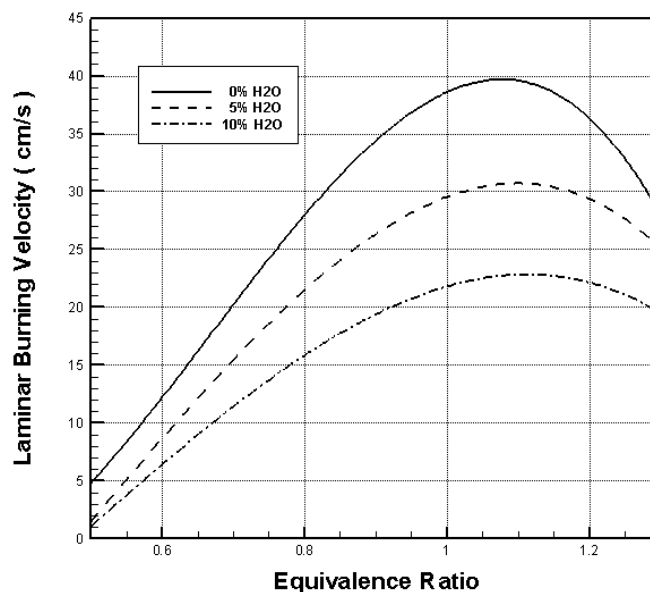
با افزایش کسر مولی آب در میان واکنش دهنده ها، کسرهای مولی CO ، CO_2 ، NO و NO_2 کاهش پیدا کرده اند. با توجه به نمودار ۵- الف می توان مشاهده نمود که در میان این گونه ها، کسر مولی CO ، بیشترین حساسیت را نسبت به اضافه نمودن آب، دارد. همانطور که در نمودار ۵- الف برای کسر مولی CO ، نشان داده شده است، پس از انفجار گاز، کسر مولی CO در حدود ۰/۰۱۵ در حالت بدون آب و در حدود ۰/۰۰۸ با کسر آب ۱۰٪ در مخلوط گاز، می باشد. در همان زمان، با افزایش یافتن کسر آب از ۱۰٪ به ۲۰٪، کسر مولی CO ، از ۰/۰۰۸ به حدود ۰/۰۰۴۵، کاهش یافته است.

در میان این گونه ها، همانگونه که در نمودار ۵- ب و ۶- ب نشان داده شده است، کسر مولی CO_2 و NO_2 کمترین میزان حساسیت را نسبت به اضافه نمودن آب دارد و با افزایش کسر آب از ۱۰٪ به ۲۰٪، کسر مولی CO_2 به آرامی از ۰/۰۵۵ به حدود ۰/۰۵ کاهش یافته است و کسر مولی NO_2 از $10^{-4} \times 0.1095$ به $10^{-5} \times 0.3040$ رسیده است که مقدار کاهش در کسر مولی این آلاینده بسیار کم است. لذا برای کاهش در مقدار دو آلاینده ذکر شده، بهتر آنست که از روشهای دیگری غیر از افزودن آب، استفاده شود. نمودار ۶- الف تغییرات کسر مولی NO را با گذشت زمان نشان می دهد. همانطور که از این نمودار لگاریتمی پیداست، اثر اضافه نمودن آب و کاهش در مقدار کسر مولی بر روی این آلاینده، بیشتر از NO_2 بوده است.

۳-۵- بررسی سرعت شعله آرام

سرعت شعله آرام بوسیله کد PREMIX [۱۵] از بسته نرم افزاری CHEMKIN II [۱۳]، بر حسب مقادیر مختلف نسبت هم ارزی، شبیه سازی شده و در نمودار ۷ در محدوده وسیعی از نسبت های هم ارزی و درصد های مختلف آب، ترسیم گردیده است.

دمای اولیه واکنش دهنده ها برابر با ۲۹۸ k و فشار اولیه برابر با ۱ atm در نظر گرفته شده است. وقتی در واکنش دهنده ها آب وجود ندارد، بیشترین سرعت شعله آرام به ازای نسبت های هم ارزی بیشتر از ۱ و وقتی $1/2 < \phi < 1$ قرار دارد، حاصل گردیده و در حدود ۴۰ cm/s بدست آمده است. اما در حالتی که آب به واکنش دهنده ها اضافه می گردد، سرعت شعله آرام نیز کاهش یافته و با اضافه نمودن ۵٪ آب به واکنش دهنده ها در بیشترین حالت، به حدود ۳۲ cm/s رسیده و در حالتی که ۱۰٪ آب به واکنش دهنده ها اضافه می گردد، بیشترین مقدار سرعت شعله آرام ۲۳ cm/s شده است. بنابراین اثر اضافه نمودن آب به واکنش دهنده ها، کاهش مقدار سرعت شعله آرام است.



نمودار ۷- نمودار سرعت شعله آرام بر اساس نسبت های هم ارزی مختلف در دمای ۲۹۸ K و فشار ۱ atm

۴- نتیجه گیری

فرآیند انفجار گاز در محفظه حجم ثابت بوسیله کد SENKIN در برنامه CHEMKINII با مکانیزم GRI-Mech3.0، مورد محاسبه قرار گرفته است. همچنین برای بررسی تاثیر افزودن آب بر روی سرعت شعله آرام از کد PREMIX استفاده گردیده است. مهمترین نتایج بدست آمده به شرح زیر است:

- دما بعد از انفجار گاز متان، با کسر آب ۱۰٪ در مخلوط گاز، ۱۰۰k کاهش یافته است. به علاوه، در مقایسه با حالت کسر آب ۲۰٪، دما در حدود ۲۲۰ K، در گاز مخلوط شده، تقلیل پیدا کرده است.
- زمان های انفجار ۰/۰۰۷۵، ۰/۰۱، ۰/۰۱۱، ۰/۰۱۲۵، ثانیه، هنگامی که کسر آب در مخلوط گاز به ترتیب ۰٪، ۱۰٪، ۱۵٪ و ۲۰٪ است، حاصل گردیده است.
- در مقایسه با حالتی که هیچ کسر آبی در مخلوط گاز وجود ندارد، فشار تا ۰/۱۵ atm با اضافه کردن ۱۰٪ کسر آب در گاز مخلوط شده کاهش یافته و به مقدار ۲atm رسیده است. همچنین فشار با کاهشی به میزان ۰/۱atm، و قتیکه کسر آب از ۱۰٪ به ۲۰٪ تغییر می کند، به مقدار ۱/۹atm، رسیده است.
- افزایش فشار و افزودن آب، با یکدیگر، سبب کاهش بیشتری در زمان رسیدن به انفجار گاز متان نسبت به حالتی که فقط تاثیر افزایش فشار در نظر گرفته شده است، می گردد.
- کسر مولی CH₄، در طی فرآیند انفجار گاز متان، درحالتی که هیچگونه آبی در واکنش دهنده ها نداشته باشیم، سریعاً در بازه زمانی ۰/۰۰۷۵s از شروع واکنش، کاهش پیدا می کند و بعد از این زمان، به طور کامل مصرف گردیده و مقدار آن به صفر می رسد ولی کسر مولی O₂ در این حالت به مقدار صفر نرسیده بلکه مقدار آن از ۰/۲۲ در ابتدای شروع واکنش به مقداری برابر با ۰/۰۷، پس از فرآیند انفجار، کاهش پیدا کرده است.
- کسر های مولی CO₂ و NO₂ کمترین میزان حساسیت را نسبت به اضافه نمودن آب، دارند و با افزایش کسر آب از ۰٪ به ۲۰٪، کسر مولی CO₂ به آرامی از ۰/۰۵۵ به حدود ۰/۰۵ کاهش یافته و کسر مولی NO₂ از $10^{-4} \times 0.095$ به $10^{-5} \times 0.304$ رسیده است.

مراجع

- 1-Mazas, A.N., Fiorina, B., Lacoste, D.A., Schuller, T., " Effects of water vapor addition on the laminar burning velocity of oxygen-enriched methane flames", Combustion and Flame, 2011.
- 2-Troiani, G., "Effect of velocity inflow conditions on the stability of a CH₄/air jetflame", Combust and Flame, Vol. 156, pp. 539-542, 2009.
- 3- Razu, D.M., Krause, U., "Comparison of empirical and semi-empirical calculation methods for venting of gas explosions", Fire Safety. J, Vol 36, pp. 1-23, 2001.
- 4-Hirano, T., " Gas explosions caused by gasification of condensed phase combustibles", J. Loss Prevent. Proc., Vol19, pp.245-249,2006.
- 5-Hirano, T., "Methodology for case studies of a accidental gas explosions", J. Loss Prevent. Proc., Vol14, pp.553-55, 2001.
- 6-Maremonti, M., Russo, G., Salzano, E., Tufano, V., "Numerical simulation of gas explosions in linked vessels", J. Loss Prevent. Proc., Vol 12 , pp. 189-194, 1999.
- 7-Zhao, Y.C., Zhang, J.Y., Chou, C.L., Li, Y., Wang, Z.H., Ge, Y.T., Zheng, C.G., "Trace element emissions from spontaneous combustion of gob piles in coal Mines", Shanxi, China, Int. J. Coal Geol., Vol 73 , pp. 52-62, 2008.
- 8-Shearer, M.J., Vincent, H.Y.T., Corr, B., "Analysis of results from large scale hydrocarbongas explosions", J. Loss Prevent. Proc. Vol13, pp. 167-173, 2001.
- 9-Ferrara, G., Benedetto, A.D., Salzano, E., Russo, G., "CFD analysis of gas explosions vented through relief pipes", J. Hazard. Mater., Vol 137, pp. 654-665, 2006.
- 10-Oh, K.H., Kim, H., Kim, J.B., Lee, S.E., "A study on the obstacle-induced variation of the gas explosion characteristics", J. Loss Prevent. Proc., Vol 14 , pp. 597-602, 2001.

- 11- Shebeko, Y.N., Tsarichenko, S.G., Korolchenko, A.Y., Burning velocities and flammability limits gaseous mixture at elevated temperatures and pressure, *Combust. Flame*, Vol 102, pp. 427–437,1995.
- 12-Law, C.K., *Combustion Physics*, Cambridge University Press, New York, 2006.
- 13- Robert, J.K., Rupley, F.M., Meeks, E., Miller, J.A., Chemkin II: a Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics, Sandia National Laboratory Report CA 94551-0969, 1988.
- 14-Andrew, E.L., Robert, J.K., James, A.M., Senkin: “a Fortran program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis”, Sandia National Laboratory Report CA 94551-0969, 1988.
- 15-Kee, J., Grcar, K., Smooke, M., Miller, J., PREMIX: “A FORTRAN Program for Modelling Steady Laminar One-dimensional Premixed Flames”, Technical Report, Sandia National Laboratories, 1985.
- 16-Smith, G.P., Golden, D.M., Frenklach, M., Moriarty, N.W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Thoma, B.C., R.K. Hanson, Song, S., Gardiner, W.C.J., Lissianski, V.V., Z.W. Qin. Available from: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- 17-Yuntao Lianga, Wen Zeng, “Numerical study of the effect of water addition on gas explosion”, *Journal of Hazardous Materials*, Vol 174, pp. 386–392, 2009.