

مطالعه اثرات سینتیک های شیمیایی بر روی احتراق در کوره های متخلخل

نگین معلمی خیابوی^{۱*}، سیامک حسین پور^۲

دانشگاه تربیت مدرس، تهران

* (negin.moallemi@modares.ac.ir)

چکیده

در تحقیق حاضر، احتراق پیش آمیخته هوا/متان در یک کوره متخلخل با استفاده از یک برنامه کامپیوتری در محیط فرترن در حالت دو بعدی شبیه سازی شده است. برای شبیه سازی واکنش های احتراقی از چهار سینتیک چند مرحله ای مختلف استفاده شده و توانایی این چهار مکانیزم در پیش بینی توزیع دما، انتشار آلاینده ها و توزیع جزء جرمی گونه های شیمیایی با هم مقایسه شده است. این چهار مکانیزم عبارتند از: مکانیزم GRI-3.0، مکانیزم GRI-2.11، مکانیزم اسکلتال (SM) و مکانیزم 17S (۱۷ جزء و ۵۸ واکنش). برای حل معادلات دو بعدی ناویر استوکس، معادلات انرژی فاز گاز و جامد و معادلات انتقال گونه های شیمیایی از روش حجم محدود بر پایه الگوریتم سیمپل استفاده شده است. پروفیل های بدست آمده برای دمای گاز، جزء جرمی گونه های شیمیایی و تشکیل آلاینده ها سازگاری خوبی با نتایج تجربی موجود نشان می دهند. نتایج نشان می دهند که این چهار مکانیزم در پیش بینی توزیع دمایی، دقت تقریباً یکسانی دارند به طوری که تفاوت بین آنها بیش تر از ۲٪ نیست. در ضمن، مکانیزم GRI-3.0 بهترین پیش بینی را در مورد آلاینده NO در مقایسه با نتایج تجربی ارائه می دهد. همچنین مکانیزم 17S در پیش بینی توزیع دما و توزیع جزء جرمی گونه های شیمیایی، سازگاری خوبی با سه مکانیزم به خصوص مکانیزم SM دیگر دارد.

واژه های کلیدی: محیط متخلخل، احتراق، سینتیک شیمیایی چند مرحله ای، حجم محدود

۱- مقدمه

در سالهای اخیر، احتراق در محیط متخلخل مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است. چرا که این سیستم ها دارای مشخصات منحصر بفردی از جمله محدوده توان دینامیکی زیاد، چگالی توان بالا، انتشار کمتر آلاینده هایی مثل CO و NO_x و سرعت بالای سوختن می باشند. در واقع، احتراق در محیط متخلخل به دو دلیل مهم از سیستم های احتراقی شامل شعله آزاد متمایز می گردند، که این دو دلیل عبارتند از: سطح تماس زیاد ماده متخلخل که موجب انتقال حرارت موثر بین جامد و گاز می شود و اختلاط خوب سوخت و اکسید کننده که موجب نفوذ و انتقال حرارت موثر در فاز گازی می گردد. بازده احتراق در محیط متخلخل بیش تر از سیستم های احتراق معمول می باشد که این امر نتیجه انتقال حرارت بهتر و موثر از طریق هدایت و تشعشع از سطوح گرم شده می باشد. در واقع آنتالپی گاز احتراقی ماتریس متخلخل را گرم می کند که در عوض این سطح گرم شده، ماتریس جامد را در ناحیه پیش گرمایش بوسیله هدایت و تشعشع گرم می نماید و بنابراین مخلوط نسوخته ورودی به وسیله ترکیبی از انتقال حرارت هدایت و تشعشع، پیش گرمایش می شود. این مکانیزم برگشت انرژی از طرفی موجب افزایش بازده و نرخ احتراق شده و از طرف دیگر کاهش دمای ماکزیمم شعله باعث کاهش انتشار آلاینده ها و هیدروکربن های نسوخته می شود.

۱- دانشجوی دکتری مهندسی مکانیک/تبدیل انرژی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

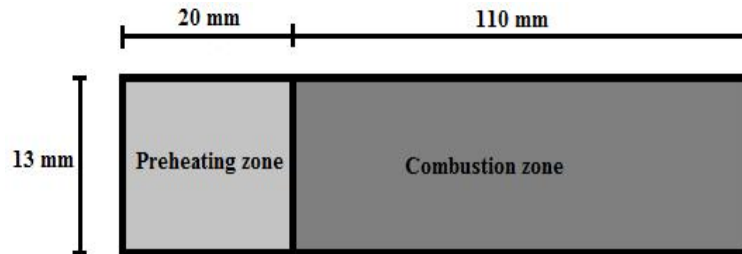
۲- دانشیار مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی سهند تبریز، دانشکده مهندسی مکانیک

بیش تر محققان، برای شبیه سازی احتراق و انتقال حرارت در چنین سیستم هایی از شبیه سازی عددی استفاده نموده اند. یاشیزاوا و همکارانش در سال ۱۹۸۸ یک شبیه سازی عددی یک بعدی با استفاده از سینتیک یک مرحله ای انجام دادند. آنها اثرات تغییر خواص انتقال حرارت را روی سرعت سوختن و ساختار شعله مورد مطالعه قرار دادند [۱]. زو و پیرا در سال ۱۹۹۷ با استفاده از یک مکانیزم چند مرحله ای (۲۷ جزء و ۷۳ واکنش) یک مدل سازی عددی انجام دادند. آنها نشان دادند که انتشار CO و NO_x بطور قابل ملاحظه ای در محیط متخلخل کاهش می یابد [۲]. چانگ جن بوسیله حل عددی یک بعدی، اثرات افزودن هیدروژن روی احتراق متان را در کوره های متخلخل مورد بررسی و تحلیل قرار دادند [۳]. آماندا جی باررا و همکارانش در سال ۲۰۰۳ یک مطالعه عددی یک بعدی برای مدل کردن یک کوره متخلخل دو قسمتی انجام دادند. آنها اثرات خواص مواد متخلخل را روی پایداری شعله بررسی نمودند [۴]. حسین پور و حدادی در سال ۲۰۰۸ اثرات پارامترهای کوره متخلخل را روی احتراق و تشکیل آلاینده ها مورد مطالعه قرار دادند. آنها از یک مدل یک بعدی و سینتیک چند مرحله ای استفاده نمودند. نتایج تحقیقات آنها نشان می دهد که انتشار CO و NO به طور عمده بستگی به ضریب انتقال حرارت حجمی و ضریب پخش ماده متخلخل دارد [۵].

علاوه بر شبیه سازی های عددی یک بعدی، تعدادی شبیه سازی دو بعدی نیز صورت گرفته است. یک مدل سازی عددی دو بعدی توسط محمد و همکارانش در سال ۱۹۹۴ برای پیش بینی بازده حرارتی، توزیع دما و نیز افت فشار با استفاده از مکانیزم یک مرحله ای صورت گرفته است. آنها اثرات تغییر در هندسه، اندازه حفره، هدایت حرارتی، سرعت سوختن و نسبت هوای اضافی را بر روی پروفیل دما و انتشار آلاینده ها بررسی نمودند [۶]. بیدی و همکارانش در سال ۲۰۰۷ یک مطالعه عددی دو بعدی درباره احتراق در محیط متخلخل انجام دادند. آنها نشان دادند که سینتیک شیمیایی چند مرحله ای منجر به نتایج دقیق تر برای توزیع دما و جزء جرمی گونه های شیمیایی می شود [۷]. ابراهیمی و همکارانش در سال ۲۰۰۷ با استفاده از یک سینتیک چند مرحله ای شامل ۷ جزء و ۵ واکنش، احتراق در محیط متخلخل را شبیه سازی نمودند. آنها برای شبیه سازی از یک مدل عددی دو بعدی استفاده نموده و اثرات نسبت هوای اضافی و پارامترهای تشعشع فاز جامد را مورد بررسی قرار دادند. نتایج تحقیقات آنها نشان می دهد که افزایش نسبت هوای اضافی موجب کاهش دمای ماکزیمم و کاهش انتشار آلاینده هایی همچون CO و NO می شود [۸].

این مقاله شبیه سازی عددی دو بعدی احتراق پیش آمیخته هوا/متان را در محیط متخلخل ارائه می دهد. به منظور حل عددی، یک برنامه کامپیوتری در محیط فرترن توسعه داده شده است. برای شبیه سازی واکنش های شیمیایی از چهار مکانیزم احتراقی چند مرحله ای استفاده می نماید و اثرات آنها را بر روی توزیع دما، توزیع جزء جرمی گونه های شیمیایی و انتشار آلاینده ها مورد بررسی قرار می دهد. در این شبیه سازی معادلات ناویر استوکس، معادلات انرژی فاز جامد و گاز و معادلات انتقال گونه های شیمیایی حل شده است. برای گسسته سازی معادلات بدست آمده از روش حجم محدود استفاده شده است و فشار و سرعت از طریق الگوریتم SIMPLE به هم ارتباط داده شده اند. در این مدل، معادلات انرژی جداگانه ای برای فاز جامد و گاز حل شده است که این دو معادله از طریق انتقال حرارت حجمی به هم مربوط می شوند. انتقال حرارت تشعشع در ماتریس جامد بوسیله ضریب انتقال حرارت موثر بیان شده است. نرخ پیشرفت واکنش های شیمیایی، خواص ترموفیزیکی و ترموشیمیایی بوسیله برنامه CHEMKINII و اطلاعات پایه آن بدست آمده است [۹].

در این مقاله، یک کوره مستطیلی در نظر گرفته شده است که شامل دو منطقه می باشد: یک منطقه پیش گرمایش و یک منطقه احتراق (شکل ۱).



شکل ۱. کوره متخلخل دو قسمتی مورد مطالعه

معمولاً منطقه پیش گرمایش از موادی با تخلخل کمتر و هدایت حرارتی پایین و منطقه احتراق از موادی با تخلخل و هدایت حرارتی بالا ساخته می شود و همچنین اندازه حفره در منطقه احتراق بزرگ می باشد. دلیل انتخاب موادی با هدایت حرارتی کمتر و اندازه حفره کوچکتر در منطقه پیش گرمایش، جلوگیری از احتراق در این منطقه می باشد.

۳- معادلات حاکم

در این مقاله، یک هندسه متقارن دو بعدی، جریان پایدار، آرام و نیوتنی و ماده متخلخل همگن در نظر گرفته شده است. برای شبیه سازی واکنش های شیمیایی از مکانیزم احتراقی اسکلتال استفاده شده است. با فرض های ذکر شده، معادله بقاء جرم، معادلات مومنوم، معادله انرژی فاز گاز، جامد و معادلات انتقال اجزاء شیمیایی بصورت زیر می باشند:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_s = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{v}_s) = \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) - \frac{\partial p}{\partial x} - \left(\frac{\Delta P}{\Delta L} \right)_x \quad (2)$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}_s) = \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}) - \frac{\partial p}{\partial y} - \left(\frac{\Delta P}{\Delta L} \right)_y \quad (3)$$

برای محاسبه افت فشار در ماتریس متخلخل از معادله فورهایمر^۱ استفاده شده است.

$$\left(\frac{\Delta P}{\Delta L} \right)_i = \frac{\mu}{k_1} \mathbf{v}_s + \frac{\mu}{k_2} \mathbf{v}_s \cdot \mathbf{v}_s \quad (4)$$

\mathbf{v}_s بیانگر سرعت ظاهری^۲ می باشد که در محیط متخلخل بصورت زیر تعریف می گردد.

$$\mathbf{v}_s = \varepsilon \mathbf{V} \quad (5)$$

که در آن ε بیانگر تخلخل ماده متخلخل می باشد.

$$\mathbf{v}_s \cdot \mathbf{v}_s c_p T_f = \sum_{k=1}^{N_s} \left(\frac{h_k}{k} T_s - T_f \right) + H (T_s - T_f) \quad (6)$$

$$0 = \sum_{i=1}^N (1 - \text{eff}_i) T_s + H (T_f - T_s) \quad (7)$$

۱ - Forchheimer

۲ - Superficial velocity

که ضریب انتقال حرارت هدایت موثر (eff_i) بصورت زیر تعریف می گردد [۱۰]:

$$eff_i = \frac{\dot{m} \cdot C_p \cdot d}{K_i} + eff \quad (8)$$

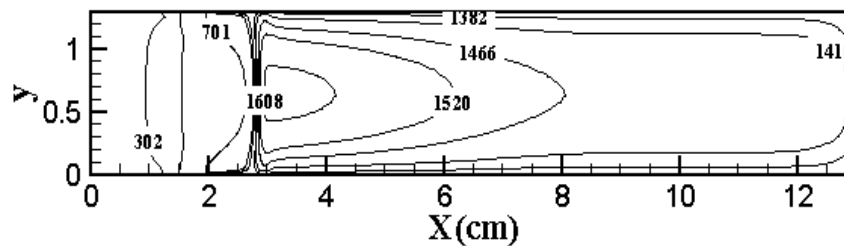
$$\mathbf{v}_s Y_k = D_{Km} Y_k + K \cdot k \quad [1, N_s] \quad (9)$$

که در این رابطه N_s تعداد اجزاء شیمیایی می باشد.

۴- نتایج و بحث

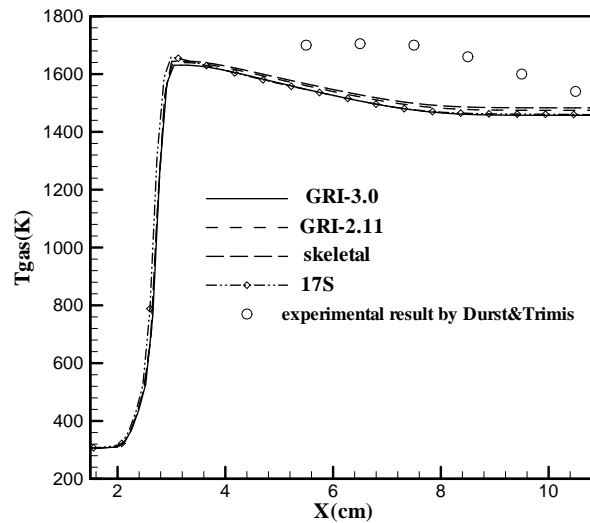
در کار حاضر، احتراق پیش آمیخته هوا/متان در یک کوره متخلخل دو قسمتی بصورت عددی در حالت دو بعدی مورد مطالعه قرار گرفته است. برای شبیه سازی فرایند احتراق از چهار سینتیک چند مرحله ای متفاوت استفاده شده که این چهار مکانیزم عبارتند از: مکانیزم skeletal [۱۱]، مکانیزم GRI-2.11 [۱۲]، مکانیزم GRI-3.0 [۱۲] و مکانیزمی متشکل از ۱۷ جزء و ۵۸ واکنش (17S). توزیع دما و اجزاء جرمی بدست آمده توسط این چهار مکانیزم با هم مقایسه گردیده اند. شکل ۲ کانتور دمای گاز بدست آمده با مکانیزم اسکلتال و با نسبت هوای اضافی ۱/۵ نشان میدهد.

Gas Temperature Contour



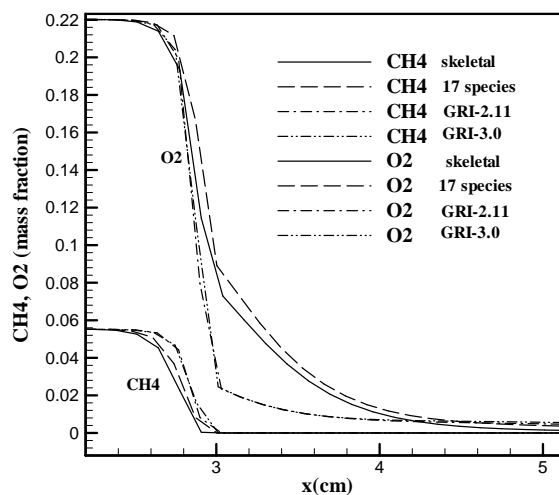
شکل ۲. کانتور دمای گاز بدست آمده با مکانیزم اسکلتال و با نسبت هوای اضافی ۱/۵

در ادامه کار، توزیع دمای گاز بدست آمده با استفاده از چهار مکانیزم در روی خط مرکزی کوره استخراج شده و با نتایج تجربی بدست آمده توسط دارست و تریمیس [۱۳] مقایسه گردیده اند که این موضوع در شکل ۳ نشان داده شده است. همانطور که در این شکل مشخص است، پروفیل دمای گاز بدست آمده توسط چهار مکانیزم سازگاری خوبی با نتایج تجربی دارد و همچنین این چهار مکانیزم دارای دقت تقریباً یکسانی در پیش بینی توزیع دمای گاز می باشند.

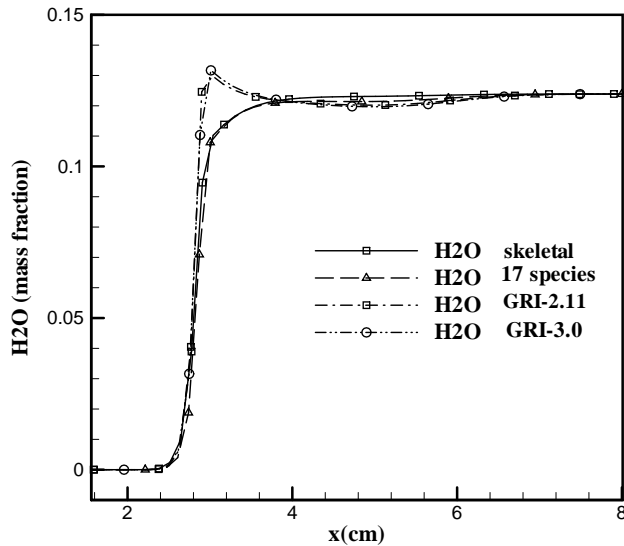


شکل ۳. مقایسه توزیع دمای بدست آمده از چهار مکانیزم با نتایج تجربی دارست و تریمیس [۱۳]

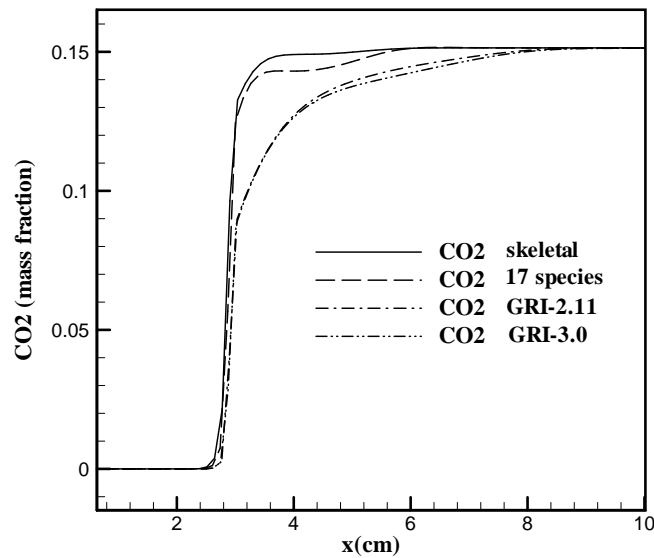
علت تفاوت بین نتایج عددی و تجربی می تواند ناشی از تفاوت و یا عدم دقت بعضی از خواص ماده متخلخل مانند هدایت حرارتی، ضریب انتقال حرارت حجمی و خواص تشعشعی باشد. هرگونه تغییر در این خواص منجر به تغییرات شدید در نتیجه نهایی می گردد. از آنجا که این خواص از طریق کارهای آزمایشگاهی بدست می آیند، با توجه به ساختار پیچیده مواد متخلخل و عملیات مکانیکی مختلف، تعیین این خواص بسیار پیچیده و غیر دقیق است. شکل ۴، ۵ و ۶ به ترتیب توزیع جزء جرمی گونه های CH_4 و H_2O , CO_2 , O_2 بدست آمده توسط چهار مکانیزم را در شرایط استوکیومتریک نشان می دهند. همانطور که در این شکل ها نشان داده شده است، نتایج حاصل از دو مکانیزم GRI-3.0 خیلی نزدیک به نتایج حاصل از مکانیزم GRI-2.11 می باشد همین امر در مورد دو مکانیزم اسکلتال و 17S صادق است.



شکل ۴. توزیع جزء جرمی CH_4 و O_2 با استفاده از چهار مکانیزم مختلف در شرایط استوکیومتریک

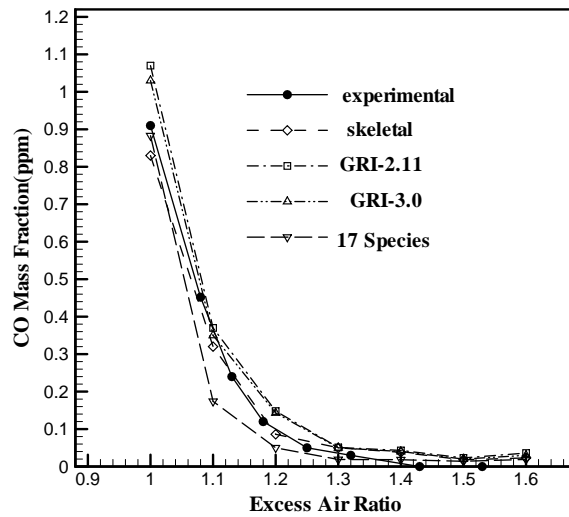


شکل ۵. توزیع جزء جرمی H₂O با استفاده از چهار مکانیزم مختلف در شرایط استوکیومتری

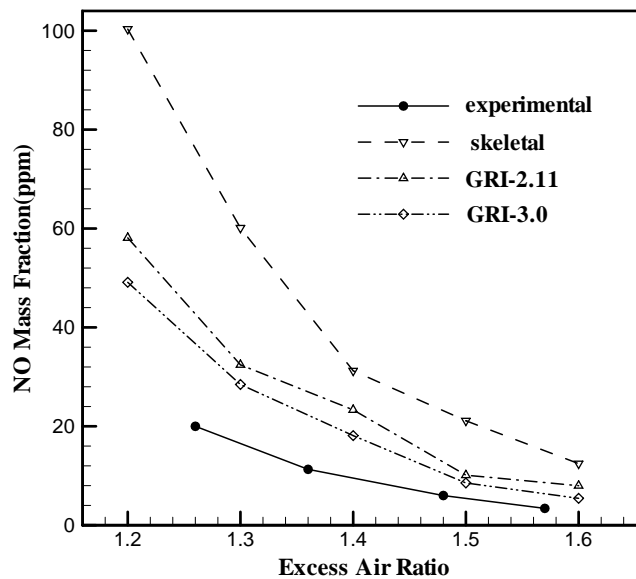


شکل ۶. توزیع جزء جرمی CO₂ با استفاده از چهار مکانیزم مختلف در شرایط استوکیومتری

در این قسمت اثرات نسبت هوای اضافی بر روی انتشار آلاینده های CO و NO مورد بررسی قرار می گیرد. شکل ۷ و ۸ در انتشار آلاینده های CO و NO بدست آمده توسط چهار مکانیزم و به ازای نسبت های هوای اضافی از ۱/۲ تا ۱/۶ را نشان داده و با نتایج تجربی موجود مقایسه می کنند.



شکل ۷. مقایسه انتشار CO بدست آمده با استفاده از چهار مکانیزم با نتایج تجربی به ازای نسبت های هوای اضافی مختلف



شکل ۸. مقایسه انتشار NO بدست آمده با استفاده از چهار مکانیزم با نتایج تجربی به ازای نسبت های هوای اضافی مختلف

همانطور که در شکل ۷ معلوم است، این چهار مکانیزم دارای دقت تقریباً یکسانی در پیش بینی آلایندة CO هستند به خصوص نتایج دو مکانیزم GRI-3.0 و GRI-2.11 در پیش بینی آلایندة CO خیلی شبیه هم هستند. در واقع در مکانیزم GRI-3.0 تغییرات چندانی در مورد شیمی CO نسبت به مکانیزم GRI-2.11 انجام نشده است. با توجه به شکل ۸، مکانیزم GRI-3.0 بهترین پیش بینی را در مورد آلایندة NO در مقایسه با چهار مکانیزم دیگر ارائه می دهد چرا که یک سری اصلاحات مربوط به سینتیک CH که برای تشکیل NO سریع^۱ مهم هستند، به این مکانیزم اضافه شده است.

1 - prompt

۵- نتیجه گیری

- چهار مکانیزم چند مرحله ای استفاده شده در این مقاله دارای دقت تقریباً یکسانی در پیش بینی توزیع دمای جامد و گاز می باشند به طوری که اختلاف بین آنها بیش تر از ۲٪ نیست.
- مکانیزم GRI 2.11 تطابق بسیار خوبی با مکانیزم GRI-3.0 در پیش بینی توزیع دما و جزء جرمی گونه های شیمیایی نشان می دهد. بنابراین می توان از مکانیزم GRI-2.11 بدلیل هزینه و زمان کمتر به جای مکانیزم GRI-3.0 استفاده نمود.
- مکانیزم اسکلتال و مکانیزم متشکل از ۱۷ جزء دارای دقت تقریباً یکسان در پیش بینی توزیع دما و محصولات احتراقی و انتشار آلاینده ها می باشند.
- از آنجا که در مکانیزم GRI-3.0 تغییرات چندانی در ارتباط با شیمی CO نسبت به مکانیزم GRI-2.11 انجام نشده است بنابراین در پیش بینی آلاینده CO تفاوت چندانی بین این دو مکانیزم وجود ندارد.
- بهترین پیش بینی در مورد آلاینده NO در مقایسه با نتایج تجربی مربوط به مکانیزم GRI-3.0 می باشد. در واقع در این مکانیزم یک سری اصلاحات در ارتباط با سینتیک CH که در تشکیل NO سریع (prompt) مهم هستند، اضافه شده است.

۶- منابع و مراجع

- 1- Yoshizawa, Y., Sasaki, K., and Echigo, R. "Analytical Study of the Structure of Radiation Controlled Flame" *Int. J Heat Mass Transfer* 31:311-319 (1988)
- 2- Zhou, X. Y., and Pereira, J. C. F., "Numerical study of combustion and pollutions formation in inert Non homogenous porous media", *Combustion Science Technology*, Vol. 130, 335-364 (1997)
- 3- Chung-jen Tseng, "Effects of Hydrogen Addition on Methane Combustion in a Porous Medium Burner" , *International Journal of Hydrogen Energy* 27 (2002) 699-707
- 4- Amanda J. Barra, Guillaume Diepvens, Janet L. Ellzey, Michael R. and Henneke., "Numerical of The Effect of Material Properties on Flame Stabilization in a Porous Burner" , *Combustion and Flame* 134 (2003) 369-379
- 5- S. Hossainpour, B. Haddadi, "Numerical study of the effects of porous burner parameters on combustion and pollutant formations", World Congress on Engineering 2008 (WCE 2008), July 2-4, London, U.K, 1505-1510
- 6- Mohamad, A. A., Ramadhani, S., and Viskanta, R., "Modeling of combustion and heat transfer in a packed bed with embedded coolant tubes", *Int. J. Heat Mass Transfer*, 37:1181-1191 (1994).
- 7- M. Bidi, M. Saffar Avval and M. Heyrani Nobari, "A Two-Dimensional Numerical Study of Combustion in Porous Media", *Eurotherm Seminar N° 81 Reactive Heat Transfer in Porous Media* (2007).
- 8- Meisam Farzaneh, Reza Ebrahimi, Mehrzad Shams and Mohamd Shafiey, "Two-dimensional Numerical Simulation of Combustion and Heat Transfer in Porous Burners", *Engineering letters*, EL_15_2_28.



- 9- Kee, R.J., Miller, J. A. and Jefferson, T.H. 91980,1996) CHEMKIN: A General Purpose problem Independent, Transportable, Fortran, Chemical Kinetic Program Package, Sandia National Lab. Report, SAND80-8003.
- 10- Stevan Nemoda, Dimosthenis Trimis and Goran Zivkovich, " Numerical Simulation of Porous Burners and Hole Plate Surface Burners", 2004
- 11- P. Glarborg, N. I. Lilleheie, S. Byggstoyl, B.F. Magnussen, P. Kilpinen and M. Hupa, 24th *Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 889-898P.* Glarborg, N. I. Lilleheie, S. Byggstoyl, B.F. Magnussen, P. Kilpinen and M. Hupa, 24th *Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 889-898.*
- 12- G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman. R.K. Hanson, S. Song, W.C. Gardiner Jr., v. Lissianski, Z. Qin, available at: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech.
- 13- F. Durst, D. Trimis, *Compact Porous Medium Burner and Heat Transfer Exchanger for Household Applications*, EC project report, (contact no. JOEC-CT95-0019), 1996.