

مطالعه عددی تاثیر سینتیک‌های شیمیایی کاهیده شده مختلف بر احتراق سوخت - اکسیژن

کیومرث مظاهری

استاد مهندسی مکانیک - دانشگاه تربیت مدرس تهران
Kiumars@modares.ac.ir

اسماعیل ابراهیمی فردویی

دانشجوی دکتری مکانیک - دانشگاه تربیت مدرس تهران
E.ebrahimifordoei@modares.ac.ir

چکیده

احتراق سوخت - اکسیژن یکی از راهکارهایی است که در سال‌های اخیر به عنوان روشی عملی جهت کاهش گازهای گلخانه‌ای مورد استفاده قرار گرفته است. با توجه به دمای بیشینه بالاتر در این احتراق نیاز به استفاده از سینتیک‌های شیمیایی کاهیده شده‌ای متناسب با این احتراق در بررسی‌های عددی می‌باشد. هدف مطالعه حاضر بررسی سینتیک‌های شیمیایی کاهیده شده مختلف در پیش‌بینی توزیع سرعت و دما می‌باشد. بدین منظور کوره احتراق سوخت - اکسیژن IFRF با استفاده از نرم افزار متن باز این فوم شبیه‌سازی شده است. در بررسی‌های انجام شده از مدل احتراقی PaSR همراه با سه سینتیک شیمیایی دو مرحله‌ای وستبروک - درایر، چهار مرحله‌ای جونز - لیندستت اصلاح شده توسط اندرسن و اصلاح شده توسط بین استفاده شده است. نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی عددی نشان دهنده آن است که سینتیک دو مرحله‌ای میزان دمای بیشینه را به صورت قابل توجهی نسبت به سینتیک‌های چهار مرحله‌ای بیشتر پیش‌بینی می‌کند؛ در حالی که سینتیک چهار مرحله‌ای جونز - لیندستت اصلاح شده توسط اندرسن بیشترین تطابق را با داده‌های تجربی دارد.

کلمات کلیدی: احتراق سوخت - اکسیژن، سینتیک شیمیایی، شبیه‌سازی عددی، حل تعادلی

مقدمه

یکی از موضوعاتی که در سال‌های اخیر نگرانی‌های اساسی در ارتباط با ادامه زندگی انسان بر روی کره زمین ایجاد کرده افزایش گازهای گلخانه‌ای و انتشار آلاینده‌های زیست محیطی است [۱]. اهمیت این موضوع به اندازه‌ای است که هر ساله کنفرانس‌های برگزار شده در ارتباط با گرمایش جهانی با حضور بلند پایه‌ترین افراد هر کشور برگزار گردیده و در آن معاهده‌های الزام آوری در ارتباط با هر کشور به تصویب می‌رسد [۱].

از مهم‌ترین عوامل تولید گازهای گلخانه‌ای استفاده از سوخت‌های فسیلی برای تامین انرژی مورد نیاز می‌باشد. مطالعات انجام شده در سال ۲۰۰۹ نشان دهنده آن است که تولید کربن دی‌اکسید به‌عنوان اصلی‌ترین گاز گلخانه‌ای رشدی ۱۵ درصدی نسبت به سال ۲۰۰۰ دارد [۱، ۲]. در این میان تولید کربن دی‌اکسید در فرآیندهای صنعتی برای تولید سیمان، آهن و فولاد، توان و حرارت و سایر کاربردهای صنعتی سهمی ۵۷ درصدی در تولید این گاز گلخانه‌ای دارد. بررسی‌های انجام شده جهت کاهش میزان انتشار گازهای گلخانه‌ای نیز حاکی از آن است که استفاده از روش دفن کردن و انتقال و ذخیره سازی کربن دی‌اکسید بهترین روش جهت کاهش میزان گازهای گلخانه‌ای تولید شده می‌باشد [۳]. روش‌های مختلفی جهت دفن و ذخیره سازی کربن دی‌اکسید وجود دارد که از جمله مهم‌ترین آن‌ها که به طور عملی نیز مورد استفاده قرار گرفته است، استفاده از احتراق سوخت - اکسیژن می‌باشد [۲].

یکی از ابزارهایی که می‌تواند منجر به گسترش سیستم‌های احتراقی سوخت - اکسیژن و جایگزینی آن‌ها با سیستم‌های احتراقی سوخت - هوا گردد استفاده از شبیه‌سازی عددی می‌باشد. در فرآیند احتراق سوخت -

اکسیژن با توجه به استفاده از غلظت اکسیژن بالاتر در سمت اکسید کننده دمای فرآیند احتراق بسیار بالا بوده که این موضوع سبب می‌شود تا تجزیه حرارتی از اهمیت بسیار بالای برخوردار باشد [۴ و ۵]. از این‌رو یکی از مهمترین موضوعات در شبیه‌سازی صحیح سیستم‌های احتراق سوخت - اکسیژن سینتیک شیمیایی مناسب مورد استفاده در آن‌ها می‌باشد. در سیستم‌های احتراق صنعتی با توجه به ابعاد بزرگ و نیاز به تعداد شبکه محاسباتی بالا امکان استفاده از سینتیک‌های کامل وجود ندارد. از این‌رو باید از سینتیک‌های شیمیایی متناسب با فرآیند احتراق سوخت - اکسیژن بدین منظور استفاده کرد. از این‌رو مطالعات زیادی در سال‌های اخیر بر روی سینتیک‌های شیمیایی کاهیده شده به منظور استفاده در احتراق سوخت - اکسیژن انجام شده است. اندرسن و همکاران [۶] به مطالعه عددی یک بعدی مکانیزم‌های کاهیده شده به منظور استفاده در احتراق سوخت - اکسیژن پرداختند. در این مطالعه ضرایب دو سینتیک دو مرحله‌ای وستبروک - درایر و چهار مرحله‌ای جونز - لیندستت به منظور استفاده در احتراق سوخت - اکسیژن اصلاح شدند. نتایج بدست آمده از این مطالعه نشان می‌دهد که سینتیک دو مرحله‌ای اصلاح شده وستبروک - درایر نسبت به سینتیک اولیه پیش‌بینی بسیار بهتری در دمای بیشینه و غلظت مونوکسید کربن در خروجی نشان می‌دهد. همچنین سینتیک چهار مرحله‌ای اصلاح شده نیز نسبت به سینتیک اولیه دقت بهتری در پیش‌بینی دمای ناحیه شعله و همچنین غلظت کربن مونوکسید در ناحیه پس از شعله دارد.

بیبرزسکی و همکاران [۷] نیز به توسعه سینتیک‌های کاهیده شده به منظور استفاده در احتراق سوخت - اکسیژن پرداختند. این مطالعه که به کمک شعله آرام پیش‌آمیخته و یک بعدی انجام گرفته شد به اصلاح سینتیک جونز - لیندستت پرداخته شد. مقایسه نتایج میان سینتیک‌های GRI3.0 و جونز - لیندستت اصلاح نشده برای توزیع دما و گونه‌ها نشان دهنده اختلاف بسیار زیاد میان نتایج می‌باشد در حالی که سینتیک اصلاح شده نتایج با دقت بسیار بالاتری را از خود نشان می‌دهد.

اصلاح سینتیک‌های دو و چهار مرحله‌ای ایجاد شده توسط اندرسن برای احتراق سوخت - اکسیژن با استفاده از دو کوره و بویلر ۱ و ۶۰۹ مگاواتی توسط بین و همکاران [۸] انجام شد. در این مطالعه علاوه بر اصلاح ضرایب واکنش‌ها به هر یک از سینتیک‌های ذکر شده یک مرحله واکنش تجزیه دی‌اکسید کربن به مونوکسید کربن اضافه گردید. نتایج بدست آمده از این بررسی نشان می‌دهد که استفاده از واکنش‌های تجزیه بیشتر در سینتیک‌های کاهش یافته همراه با ضرایب مناسب می‌تواند منجر به پیش‌بینی بهتر توزیع دما و گونه‌های احتراقی مهم همچون مونوکسید کربن و دی‌اکسید کربن گردد. علاوه بر این تاثیر استفاده از سینتیک شیمیایی مناسب هم در هندسه‌های با توان حرارتی نسبتاً کوچک (یک مگاوات) و هم در ابعاد صنعتی (۶۰۹ مگاوات) قابل مشاهده است.

با توجه به اینکه سینتیک شیمیایی تاثیر قابل توجهی بر نتایج حاصل از شبیه‌سازی عددی می‌تواند داشته باشد، در مطالعه حاضر ابتدا به حل تعادلی با استفاده از سینتیک‌های کاهیده شده مختلف و مقایسه آن‌ها با

شعله‌های احتراق سوخت- هوا تجزیه مولکولی منجر به کاهش حدود ۲۰۰ تا ۳۰۰ کلونی در دمای آدیباتیک شعله می‌شود (این موضوع با مقایسه سینتیک تک مرحله‌ای و سینتیک مفصل (با دو سینتیک دو و چهار مرحله‌ای) کاملاً قابل مشاهده است). سه سینتیک دو و چهار مرحله‌ای و همچنین سینتیک مفصل تفاوت قابل ملاحظه‌ای در دمای آدیباتیک شعله در شرایط احتراق سوخت- هوا ندارند. در حالی که احتراق سوخت- اکسیژن مورد بررسی قرار گرفته است (شکل ۲)، اثرات تجزیه به شدت روی دمای آدیباتیک شعله اثر می‌گذارد که این موضوع از شکل ۲ به خوبی قابل مشاهده است. با صرف نظر از واکنش‌های تجزیه‌ای و در شرایط استوکیومتری، دمای آدیباتیک شعله (سینتیک تک مرحله‌ای) به دمای بیشینه شعله‌ای بیش از ۵۰۰۰ کلون می‌رسد که این موضوع در مقایسه با شرایط در نظر گرفتن واکنش‌های تجزیه‌ای به طور کامل (سینتیک GRI3.0) که دمایی حدود ۳۰۰۰ کلون را نشان می‌دهد، بسیار تفاوت دارد. این موضوع اهمیت در نظر گرفتن واکنش‌های تجزیه‌ای در سینتیک‌های مورد استفاده در احتراق سوخت- اکسیژن را بخوبی نشان می‌دهد. با توجه به دمای پیش‌بینی شده حدود ۳۰۰۰ کلون توسط سینتیک GRI3.0، پیش‌بینی می‌شود که در فرآیند احتراقی سوخت- اکسیژن به علت داشتن تلفات انرژی ناشی از انتقال حرارت تشعشعی از شعله و واکنش‌های شیمیایی غیر تعادلی به دمایی معادل با ۲۷۰۰ تا ۲۸۰۰ کلون می‌رسیم.

در کوره IFRF مورد بررسی نسبت هم ارزی برابر با ۰٫۹۸۷۱ می‌باشد که این بیانگر کارکرد کوره در شرایط رقیق سوختی می‌باشد. بررسی‌های انجام شده برای این نسبت هم‌ارزی در حالت متان- اکسیژن مقادیر دما را مطابق با جدول ۱ پیش‌بینی می‌کند که تفاوت‌های جدی در پیش‌بینی دما به وضوح قابل مشاهده است.

جدول ۱- مقادیر دمای شعله آدیباتیک بدست آمده با استفاده از سینتیک‌های مختلف در حالت حل تعادلی برای شرایط عملکردی کوره

IFRF	
نوع سینتیک	مقدار دمای شعله آدیباتیک (K)
یک مرحله‌ای	۵۱۲۹
دو مرحله‌ای بین	۳۸۲۹
چهار مرحله‌ای بین	۳۳۵۹
چهار مرحله‌ای اندرسن	۳۰۳۳

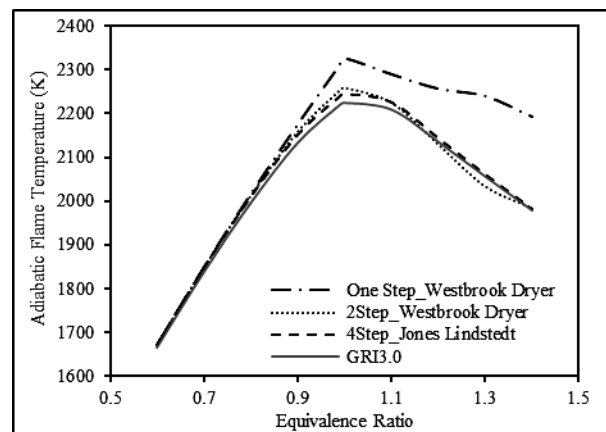
شرایط حاکم بر کوره IFRF

جهت انجام شبیه‌سازی‌های عددی از کوره IFRF (با توان ۰٫۷۸ مگاوات) با مشعل مومنتوم بالا استفاده شده است. هندسه کوره مورد بررسی و ابعاد آن به همراه قطر نازل‌های سوخت و هوا در شکل ۳ نشان داده شده است. با توجه به شکل ۳، کوره احتراقی مورد بررسی، کوره‌ای به طول ۳۴۴۰ میلی‌متر می‌باشد که دارای سطح مقطع مربعی شکل با ابعاد ۱۰۵۰ میلی‌متر است. در انتهای کوره و برای خروجی محصولات احتراق دودکشی به طول ۷۴۰ میلی‌متر و قطر ۵۰۰ میلی‌متر در نظر گرفته شده است. مشعل کوره مورد بررسی نیز شامل دو ورودی متفاوت است. قسمت مرکزی مشعل قطری برابر با ۱۶ میلی‌متر که در آن سوخت جریان دارد. همچنین از یک می‌شود، گاز طبیعی استفاده شده در مطالعه تجربی دارای درصدهای مختلفی از هیدروکربن‌ها می‌باشد که قسمت عمده آن را متان (۸۶ درصد از

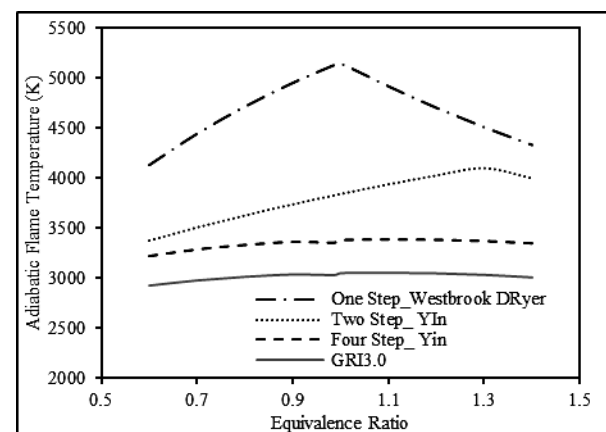
سینتیک‌های کامل پرداخته و سپس با استفاده از شبیه‌سازی عددی کوره IFRF به مقایسه میان دو سینتیک چهار مرحله‌ای اصلاح شده و یک سینتیک دو مرحله‌ای اصلاح شده که به منظور استفاده در احتراق سوخت- اکسیژن توسعه داده شده‌اند، می‌پردازیم.

حل تعادلی با استفاده از سینتیک‌های مختلف

در مطالعه حاضر ابتدا از محاسبات تعادلی پیش از آن که شبیه‌سازی‌های عددی انجام گیرد، استفاده شده است. این کار به منظور دستیابی به فهم اولیه‌ای از دمای شعله بیشینه انجام شده است. به منظور بررسی تعادلی احتراق سوخت- هوا از سینتیک‌های تک مرحله‌ای [۹]، دو مرحله‌ای وستبروک- درایر [۶]، چهار مرحله‌ای جونز- لیندستت [۶] و GRI3.0 استفاده شده است. همچنین به منظور بررسی احتراق سوخت- اکسیژن نیز از سینتیک‌های یک مرحله‌ای [۹]، دو مرحله‌ای بین (اندرسن اصلاح شده) [۸]، چهار مرحله‌ای بین (اندرسن اصلاح شده) [۸] و سینتیک کامل GRI3.0 استفاده شده است. شکل‌های ۱ و ۲ به ترتیب به مقایسه دمای آدیباتیک شعله در نسبت‌های هم ارزی مختلف با استفاده از سینتیک‌های بیان شده پرداخته شده است.



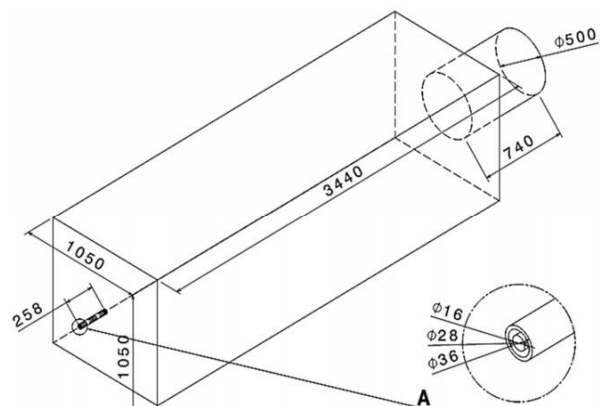
شکل ۱- مقایسه دمای شعله آدیباتیک بر حسب نسبت هم‌ارزی در شرایط استفاده از سینتیک‌های شیمیایی مختلف در احتراق سوخت- هوا



شکل ۲- مقایسه دمای شعله آدیباتیک بر حسب نسبت هم‌ارزی در شرایط استفاده از سینتیک‌های شیمیایی مختلف در احتراق سوخت- اکسیژن

با مقایسه شکل‌های ۱ و ۲ به وضوح می‌توان اثرات کاملاً متفاوتی از تجزیه مولکولی در احتراق سوخت- اکسیژن و سوخت- هوا را مشاهده کرد. در قسمت حلقوی شکل هم محور با وردی سوخت با قطر داخلی ۲۸ و قطر خارجی ۳۶ میلی‌متر اکسید کننده به دورن کوره تزریق می‌شود. طول

لوله‌های ورودی سوخت و اکسیدکننده نیز برابر با ۲۵۸ میلی‌متر می‌باشد.



شکل ۲- هندسه و ابعاد کوره IFRF

مجموع ۹۴ درصد هیدروکربن موجود در گاز طبیعی استفاده شده) تشکیل می‌دهد. هم چنین ۶ درصد گاز مورد استفاده نیز به نیتروژن، دی‌اکسید کربن و اکسیژن اختصاص دارد. در مطالعه حاضر از سینتیک‌های دو و چهار مرحله‌ای مختلف جهت انجام شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است که در این سینتیک‌ها تنها شاهد هیدروکربن متان هستیم. از این رو در شبیه‌سازی‌ها سهم سایر هیدروکربن‌ها که حدود ۸ درصد می‌باشد به متان اختصاص داده شده است (باید اشاره کرد که برای هیدروکربن‌های با یک تا چهار اتم کربن سینتیک چهار مرحله‌ای مورد استفاده توسعه داده شده است؛ اما با توجه به سهم پایین هیدروکربن‌هایی که بیش از یک اتم کربن دارند و زمان محاسباتی بسیار بالاتر در صورت استفاده از واکنش‌های سایر سینتیک‌ها، در مطالعه حاضر تنها سینتیک متان لحاظ شده است). هم چنین با توجه به اینکه بیش از ۹۹٫۵ درصد از اکسیدکننده را اکسیژن تشکیل می‌دهد (جدول ۳)، از اکسیژن خالص به عنوان اکسیدکننده استفاده شده است [۷].

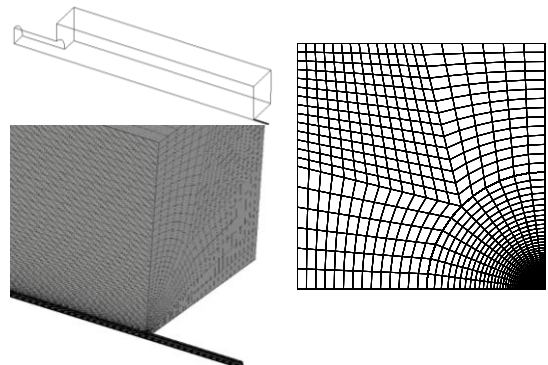
جدول ۲- مقادیر کسر مولی گونه‌های مختلف تشکیل دهنده سوخت

	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	C ₄ H ₁₀
درصد	۸۶	۵٫۴	۱٫۸۷	۰٫۵۸
مولی گونه	C ₅ H ₁₂	CO ₂	N ₂	O ₂
	۰٫۱۴	۱٫۷۹	۴٫۰۱	۰٫۲۱

جدول ۳- مقادیر کسر مولی اجزای تشکیل دهنده اکسید کننده

	N ₂	H ₂ O	CO ₂	C _n H _m
درصد	کمتر از	کمتر از	کمتر از	کمتر از
مولی گونه	O ₂	ppm	ppm	ppm
	۹۹٫۵	۱۰۰	۵	۲۰

جهت انجام شبیه‌سازی‌ها با توجه به تقارن هندسی و تقارن فیزیکی (که با تقریب بسیار خوبی می‌توان آن را در نتایج حاصل از داده‌های تجربی نیز مشاهده کرد [۱۰])، یک چهارم کوره جهت انجام بررسی‌ها در نظر گرفته شده است. این کار به منظور کاهش حجم محاسبات عددی صورت گرفته است. در شکل ۴ محدوده حل در نظر گرفته شده در این مطالعه و شبکه‌بندی ایجاد شده نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود از شبکه‌بندی منظم و ساختار یافته غیریکنواخت در بررسی‌ها استفاده شده است. غیریکنواختی شبکه به نحوی ایجاد شده است که در قسمت‌های با گرادیان‌های بالاتر و در مجاورت قسمت‌هایی که تغییر سطح مقطع مشاهده می‌شود، از شبکه‌بندی ریزتری استفاده شده است.



شکل ۴- محدوده حل عددی و شبکه‌بندی ایجاد شده

شرایط مرزی حاکم بر مسئله

شرایط مختلف حاکم بر ورودی‌های سوخت و اکسیدکننده شامل دبی‌های جریان، سرعت و مومنتوم جریان سوخت و اکسید کننده و دما و فشار هر یک از این جریان‌ها در جدول ۴ آورده شده است. همچنین جهت جلوگیری از نفوذ هوا به داخل محفظه احتراق، فشاری معادل با ۳ میلی‌متر آب در کوره ایجاد شده که این موضوع در شبیه‌سازی عددی نیز لحاظ شده است. سایر شرایط مرزی در شکل ۵ نشان داده شده است. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود، هندسه مورد بررسی دارای دو صفحه با شرط مرزی متقارن می‌باشد که برای اعمال آن گرادیان تمامی متغیرها برابر با صفر در نظر گرفته شده است. همچنین برای دمای دیواره‌های بالایی و جانبی کوره با توجه به داده‌های تجربی بیان شده در مرجع [۷، ۸]، از پروفیل دمایی مطابق با رابطه ۱ استفاده شده است (در رابطه ۱، X نشان دهنده فاصله محوری از ابتدای کوره می‌باشد). برای دیواره ابتدایی و انتهایی کوره که به ترتیب در مجاورت نازل‌های ورودی سوخت و هوا و همچنین دودکش می‌باشند، 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 آن فشار ثابت در خروجی و گرادیان سرعت صفر می‌باشد. برای دما نیز در این شرط مرزی گرادیان صفر لحاظ شده است. لازم به ذکر است که برای تمامی دیواره‌ها شرط مرزی سرعت به صورت شرط عدم لغزش در نظر گرفته شده است.

با توجه به شبکه‌بندی ایجاد شده، بررسی استقلال نتایج بدست آمده از شبکه محاسباتی برای شبکه‌هایی با ۵۱۰۰۰۰، ۱۰۷۰۰۰۰ و ۲۱۲۰۰۰۰ انجام شد که نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که شبکه‌ای با ۱۰۷۰۰۰۰ سلول محاسباتی بیانگر شبکه مستقل شده می‌باشد.

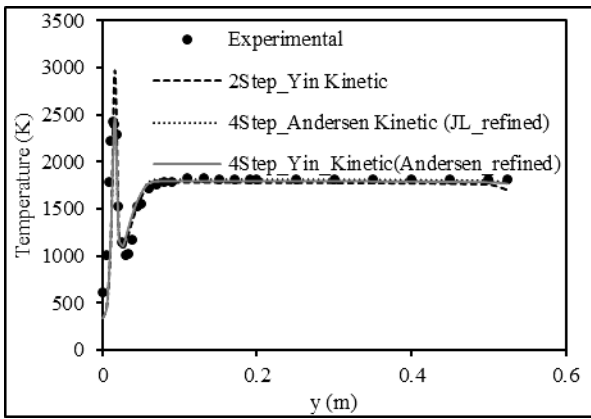
شرایط حاکم بر کوره

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 اکسید کننده را مطابق با جدول ۲ نشان می‌دهد [۱۰ و ۱۱]. همان‌طور که در این جدول مشاهده

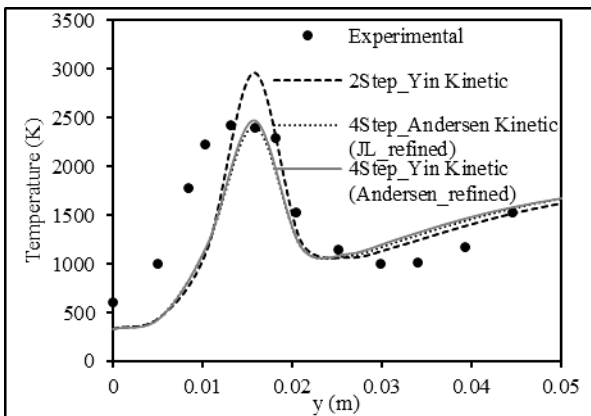
$$T(x) = 1700.598 + 212.5872x - 46.66929x^2 \quad (1)$$

جدول ۴- شرایط مرزی حاکم بر ورودی‌های سوخت و اکسیدکننده

نوع جریان	متغیر	مقدار متغیر
جریان اکسیدکننده	دبی جرمی	224.5 kg/h
	سرعت ورودی	118.53 m/s
	مومنتوم	6.9 N
	دما	298.15 K
	فشار	101369.2 Pa
جریان سوخت	دبی جرمی	63 kg/h
	سرعت ورودی	114.19 m/s
	مومنتوم	1.86 N
	دما	298.15 K
	فشار	101369.2 Pa
	چگالی	0.76225 kg/m ³

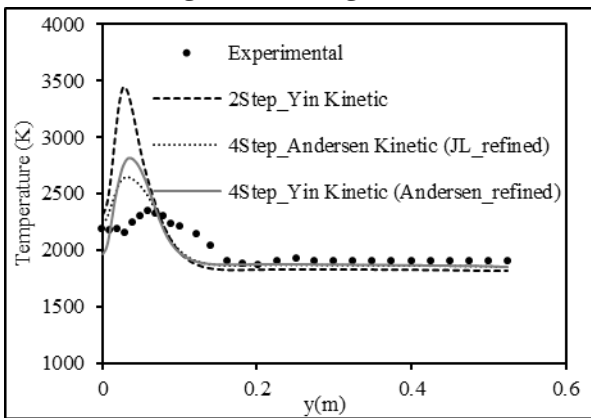


(الف)

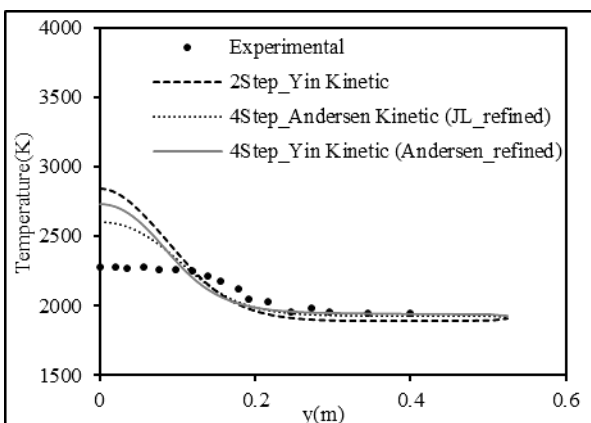


(ب)

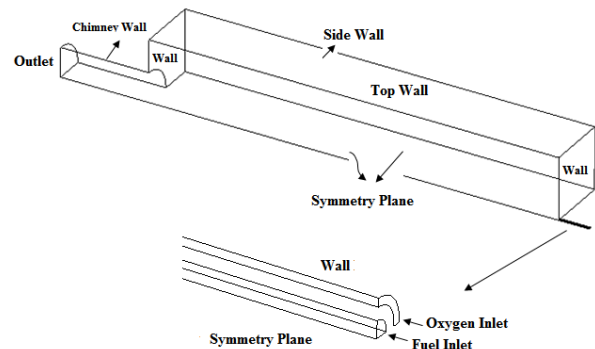
شکل ۷- تغییرات دمای شعاعی در فاصله ۲۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره



شکل ۸- تغییرات دمای شعاعی در فاصله ۸۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره



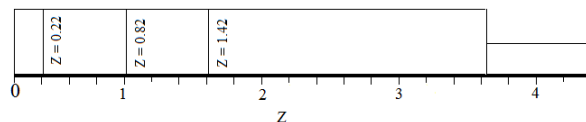
شکل ۹- تغییرات دمای شعاعی در فاصله ۱۴۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره



شکل ۵- شرایط مرزی اعمال شده بر محدوده حل عددی

نتایج

با توجه به مطالعه تعادلی انجام شده در قسمت قبل در این قسمت به مطالعه عددی سه سینتیک دو مرحله‌ای یین، چهار مرحله‌ای اندرسن (اصلاح شده جونز- لیندست) و چهار مرحله‌ای یین (اصلاح شده اندرسن) پرداخته و نتایج مربوط به آن‌ها را با داده‌های تجربی ارائه شده مقایسه می‌کنیم. برای مقایسه داده‌های بدست آمده از شبیه‌سازی‌ها با داده‌های تجربی در امتداد عرض کوره، سه مقطع ۰.۲۲، ۰.۸۲ و ۱.۴۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره مطابق با شکل ۶ در نظر گرفته شده است.

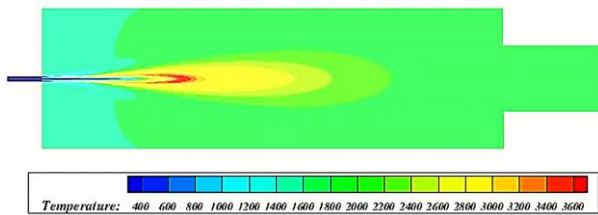


شکل ۶- مقاطع شعاعی جهت بررسی نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی‌ها

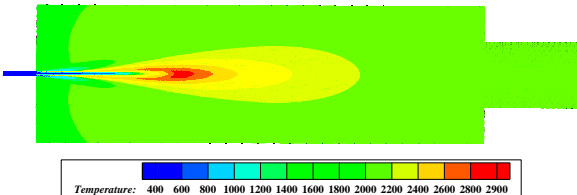
در شکل‌های ۷ تا ۹ به ترتیب توزیع دما برای سینتیک‌های مختلف بیان شده در مقاطع مختلف نشان داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، سینتیک دو مرحله‌ای با وجود اصلاحات ضرایب و در نظر گرفتن یک مرحله واکنش تجزیه‌ای هم‌چنان بیشینه دما را در تمامی مقاطع به میزان قابل توجهی بیشتر از داده‌های تجربی پیش‌بینی می‌کند (سینتیک دو مرحله‌ای نسبت به سینتیک‌های چهار مرحله‌ای در محل تشکیل شعله مقادیر دما را به صورت قابل ملاحظه‌ای بیشتر پیش‌بینی می‌کند).

نتایج دمایی پیش‌بینی شده برای دما در دو مقطع ۰.۸۲ و ۱.۴۲ سانتی‌متری

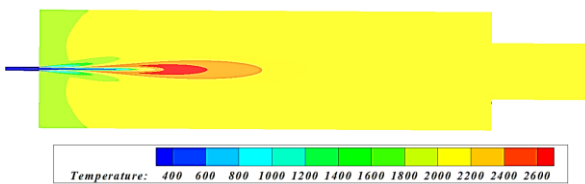
دمایی ۲۵۰ کلون کمتر قابل مشاهده است.



(الف)



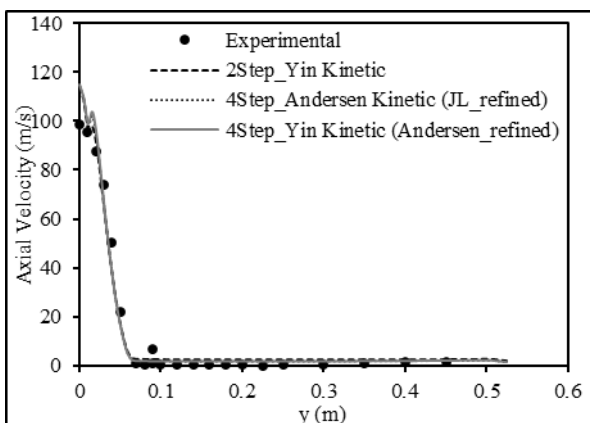
(ب)



(ج)

شکل ۷- کانتور دما برای سینتیک‌های شیمیایی مختلف استفاده شده، الف: سینتیک دو مرحله‌ای یین، ب: سینتیک چهار مرحله‌ای یین، ج: سینتیک چهار مرحله‌ای اندرسن

با توجه به توضیحات بیان شده پیرامون توزیع دما و کانتور آن می‌توان گفت که سینتیک چهار مرحله‌ای اندرسن در شرایط استفاده از مدل احتراقی PaSR پیش‌بینی دقیق‌تری نسبت به سینتیک یین دارد. شکل‌های ۱۱ تا ۱۳ تغییرات سرعت بر حسب عرض کوره در فواصل طولی ۲۲، ۸۲ و ۱۴۲ میلی‌متری را برای سینتیک‌های شیمیایی مختلف نشان می‌دهد. با توجه به نتایج بدست آمده سینتیک شیمیایی تأثیر چندانی بر روی توزیع سرعت نداشته و سینتیک دو مرحله‌ای با توجه به پیش‌بینی بالاتر دما و در نتیجه چگالی کمتر در قسمت‌های ابتدایی عرض کوره سرعت کمتری نسبت به دو سینتیک دیگر پیش‌بینی کرده است.



شکل ۱۱- تغییرات عرضی سرعت در فاصله ۲۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره

برای سینتیک دو مرحله‌ای خطای بیشتری نسبت به مقطع ۲۲ سانتی‌متری نشان می‌دهد که این موضوع به علت پهن تر شدن شعله با حرکت در طول کوره می‌باشد. در واقع باید گفت که در ناحیه تشکیل شعله (ناحیه دما بالای کوره) واکنش‌های تجزیه‌ای اهمیت بسیار بالایی در پیش‌بینی دما دارند که همین موضوع دلیل پیش‌بینی بهتر نتایج بدست آمده به وسیله سینتیک‌های چهار مرحله‌ای نسبت به سینتیک دو مرحله‌ای است. همچنین باید اشاره کرد که در شکل ۷-ب برای بیان اختلاف میان سینتیک‌های مختلف در پیش‌بینی دما در طول ۲۲ سانتی‌متری کوره، توزیع دما در ۵ سانتی‌متر شعاع ابتدایی کوره نشان داده شده است؛ با توجه به این شکل می‌توان به وضوح پیش‌بینی بیشینه دمای بیشتر در سینتیک دو مرحله‌ای را مشاهده نمود.

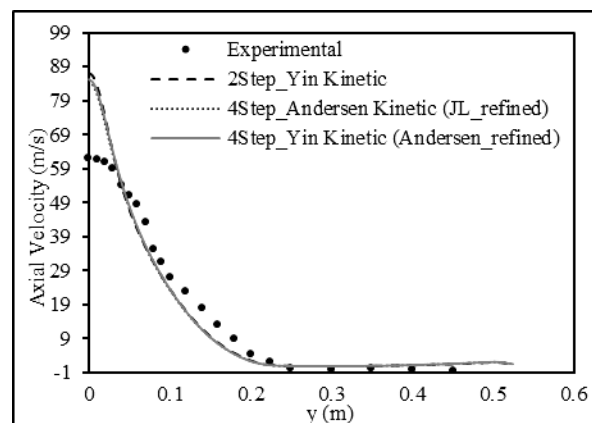
در شکل‌های ۷ تا ۹ دو سینتیک چهار مرحله‌ای مختلف نیز مورد مطالعه قرار گرفته است. با توجه به نتایج بدست آمده در مقاطع مختلف سینتیک اندرسن نتایج بهتری را نسبت به سینتیک یین در مقاطع مختلف نشان می‌دهد که این موضوع برخلاف نتایج بدست آمده در مرجع [۸] می‌باشد؛ در این مرجع یین با استفاده از مدل احتراقی EDC به شبیه‌سازی کوره مورد بررسی در این پژوهش پرداخته است که با توجه به نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی‌های یین سینتیک اصلاح شده توسط ایشان نتایج بهتری را نسبت به سینتیک اندرسن نشان می‌دهد که در مطالعه حاضر نتایج خلاف این موضوع را نشان می‌دهند.

همان‌طور که در شکل‌ها مشاهده می‌شود در طول ۸۲ و ۱۴۲ سانتی‌متری و در قسمت‌های ابتدایی نمودارها اختلاف بیشتری نسبت به سایر قسمت‌ها مشاهده می‌شود. این موضوع با توجه به بررسی‌های صورت گرفته می‌تواند ناشی از دو عامل باشد:

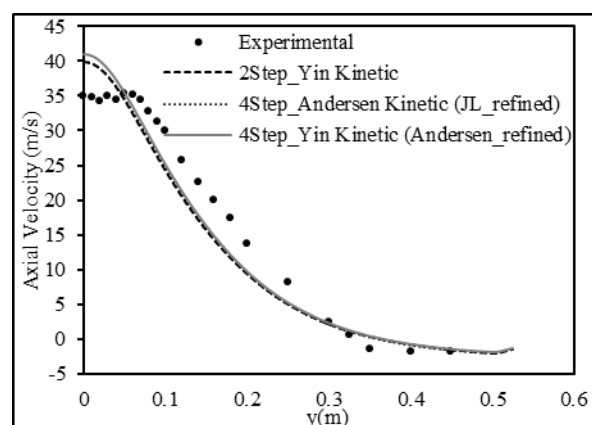
- ۱- با توجه به گزارش ارائه شده [۱۰] برای نتایج تجربی در اندازه‌گیری دما از روش رومن اسپکترومتری استفاده شده که این روش در اندازه‌گیری دماهای بیش از ۲۲۰۰ کلون خطای بسیار زیادی را شامل می‌شود. در نواحی ابتدایی نمودارها با توجه به وجود شعله در آن، دما بیشتر از ۲۲۰۰ کلون بوده و از این رو در این قسمت‌ها خطا و عدم قطعیت بیشتری در داده‌های تجربی می‌توان مشاهده نمود.
- ۲- عامل دوم مربوط به خطاهای عددی و همچنین استفاده از سینتیک کاهش یافته جهت انجام محاسبات می‌باشد. با توجه به بررسی تعادلی مشاهده شد که استفاده از سینتیک‌های کاهش یافته در احتراق سوخت-اکسیژن منجر به پیش‌بینی دمای بیشتر شعله می‌شود؛ همین موضوع عاملی است تا دمای نقاط ابتدایی شامل خطای بیشتری باشند.

شکل ۱۰ مقایسه میان کانتورهای دما برای سه سینتیک مورد استفاده را نشان می‌دهد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود بیشینه دمای پیش‌بینی شده در سینتیک دو مرحله‌ای یین ۳۸۰۰ کلون می‌باشد که این دما بسیار بیشتر از دمای بیشینه پیش‌بینی شده توسط دو سینتیک چهار مرحله‌ای است که این موضوع با توجه به مطالب بیان شده مربوط به واکنش‌های تجزیه‌ای می‌باشد. علاوه بر این دمای پیش‌بینی شده توسط سینتیک یین بیش از ۲۹۰۰ کلون می‌باشد که این مقدار تقریباً معادل با دمای آدیاباتیک شعله پیش‌بینی شده توسط محاسبات تعادلی به وسیله سینتیک GRI3.0 می‌باشد؛ دمای بیشینه بدست آمده توسط سینتیک اندرسن بیش از ۲۶۰۰ کلون می‌باشد. با توجه به وجود شرایط غیر تعادلی و برگشت‌ناپذیری‌ها در شرایط واقعی نسبت به محاسبات تعادلی، دمای بیشینه شعله باید کمتر از دمای آدیاباتیک شعله باشد که این موضوع تنها در سینتیک اندرسن با

- 2- S. Bouzalakos, M. Maroto- Valer, Overview o *Carbon Dioxide (CO₂) Capture and Storage Technology*, Vol. 2, pp. 1-24, 2010.
- 3- L. ZHENG, Z.-j. KANG, L. ZHANG, Q.-x. Zhao, The Thoery and Application of Oxygen-enhanced Combustion [J], *Industrial Boiler*, Vol. 3, pp. 003, 2004.
- 4- R. Prieler, B. Mayr, M. Demuth, D. Spoljaric, C. Hochenauer, Application of the steady flamelet model on a lab-scale and an industrial furnace for different oxygen concentrations, *Energy*, Vol. 91, pp. 451-464, 2015.
- 5- B. Mayr, R. Prieler, M. Demuth, C. Hochenauer, The usability and limits of the steady flamelet approach in oxy-fuel combustions, *Energy*, Vol. 90, pp. 1478-1489, 2015.
- 6- J. Andersen, C. L. Rasmussen, T. Giselsson ,P. Glarborg, Global combustion mechanisms for use in CFD modeling under oxy-fuel conditions, *Energy & Fuels*, Vol. 23, No. 3, pp. 1379-1389, 2009.
- 7- J. Bibrzycki, T. Poinso, Reduced chemical kinetic mechanisms for methane combustion in O₂/N₂ and O₂/CO₂ atmosphere, *Working note ECCOMET WN/CFD/10*, Vol. 17, 2010.
- 8- C. Yin, L. A. Rosendahl, S. K. Kær, Chemistry and radiation in oxy-fuel combustion: a computational fluid dynamics modeling study, *Fuel*, Vol. 90, No. 7, pp. 2519-2529, 2011.
- 9- C. K. Westbrook, F. L. Dryer, Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames, *Combustion science and technology*, Vol. 27, No. 1-2, pp. 31-43, 1981.
- 10- N. Lallemand, J. Dugue, R. Weber, Analysis of the experimental data collected during the OXYFLAM-1 and OXYFLAM-2 experiments, *IFRF Doc F*, Vol. 85, 1997.
- 11- U. Bollettini, F. Breussin, N. Lallemand, R. Weber, Mathematical modeling of oxy-natural gas flames, *IFRF Doc*, pp. F85, 1997.



شکل ۱۲- تغییرات عرضی سرعت در فاصله ۸۲ سانتی متری از ابتدای کوره



شکل ۱۳- تغییرات عرضی سرعت در فاصله ۱۴۲ سانتی متری از ابتدای کوره

جمع بندی

در مطالعه حاضر به مطالعه تاثیر سینتیک شیمیایی های کاهیده شده مختلف بر توزیع سرعت و دما در احتراق سوخت-اکسیژن پرداخته شد. بدین منظور از نرم افزار متن باز این فوم به منظور انجام شبیه سازی ها استفاده کرده و با استفاده از سه سینتیک شیمیایی دو مرحله ای وستبروک درایر اصلاح شده، چهار مرحله ای جونز-لیندست اصلاح شده و چهار مرحله ای اندرسن اصلاح شده به انجام شبیه سازی ها پرداخته شد. نتایج بدست آمده از شبیه سازی ها نشان دهنده آن است که سینتیک شیمیایی مورد استفاده بر روی توزیع دما تاثیر چندانی نداشته و به مقدار ناچیزی آن را تغییر می دهد. اما بررسی تعادلی و شبیه سازی عددی انجام شده نشان دهنده آن است که نوع سینتیک شیمیایی کاهیده شده مورد استفاده و همچنین ضرایب به کار رفته در آن تاثیر قابل توجهی بر روی نتایج بدست آمده از شبیه سازی های عددی دارد. هرچه سینتیک شیمیایی مورد استفاده شامل تعداد واکنش های تجزیه ای بیشتری باشد، دقت بالاتری در پیش بینی متوسط دمایی و همچنین دمای بیشینه خواهد داشت. علاوه بر این ضرایب مورد استفاده در احتراق سوخت-اکسیژن نیز باید به نحوی باشند که در آن ها اثر افزایش دما لحاظ گردد.

مراجع

- 1- M. M. Maroto-Valer, *Developments and Innovation in Carbon Dioxide (CO₂) Capture and Storage Technology: Carbon Dioxide (CO₂) Storage and Utilisation*: Elsevier, 2010.