مجموعه مقالات هفتمین کنفرانس سوخت و احتراق ایران
۲۵ و ۲۴آبان ۱۳۹۶، ایران، تهران، دانشگاه صنعتی شریف
FCCI-2018-1051

مطالعه عددی تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 در جریان اکسیدکننده در احتراق متان- اکسیژن

علی اصغری
دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک دانشگاه تربیت مدرس
Ali.asghari6990@gmail.com

کیومرث مظاهری
استاد دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه تربیت مدررس
Kiumars@modares.ac.ir

اسماعیل ابراهیمی فردویی
دانشجوی دکتری مهندسی مکانیک دانشگاه تربیت مدرس
E.Ebrahimifordoei@modares.ac.ir

چکیده

افزایش گازهای گلخانه‌ای طی سال‌های اخیر نگرانی‌های گسترده‌ای را در بر داشته است. احتراق سوخت-اکسیژن یک فناوری امیدوارکننده با هدف کاهش CO_2 در اتمسفر می‌باشد. در این تکنولوژی احتراقی اکسیژن به جای هوا به عنوان اکسیدکننده در احتراق شرکت می‌کند. در فرآیند احتراق سوخت-اکسیژن از آن‌جا که دمای بیشینه بسیار بالا می‌باشد، از تزریق CO_2 به عنوان اصلی‌ترین محصول این احتراق همراه با اکسیدکننده استفاده می‌شود. یکی از اصلی‌ترین مشکلات ایجاد شده به دنبال اثر شیمیایی تزریق CO_2، تجزیه‌ی این گاز و افزایش میزان مونوکسید کربن تولید شده در فرآیند احتراق می‌باشد. هدف از مطالعه‌ی حاضر بررسی تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 در احتراق اکسیژن-سوخت می‌باشد. برای انجام این مطالعه از حلگر یک‌بعدی شعله نفوذی جریان متقابل در نرم افزار کمکین استفاده گردیده و در آن اثر تزریق CO_2 بر میزان مونوکسیدکربن تولید شده و توزیع دما مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج بدست آمده نشان دهنده آن است که با افزایش درصد تزریق CO_2 سهم تاثیر فیزیکی افزایش می‌یابد و سهم تاثیر شیمیایی کاهش می‌یابد که این موضوع به علت کاهش تجزیه‌ی CO_2 در اثر کاهش دما می‌باشد.

کلمات کلیدی: **احتراق سوخت- اکسیژن، تزریق دی‌اکسید کربن، تاثیر شیمیایی و فیزیکی دی اکسیدکربن، حلگر شعله نفوذی جریان متقابل**

مقدمه

از سال 1990، نگرانی‌های ایجاد شده پیرامون افزایش سطح انتشار گازهای گلخانه‌ای و تغییرات شدید آب و هوایی سبب شد تا تکنولوژی احتراق سوخت-
اکسیژن مورد توجه قرار گرفته و تحقیقات بر روی این احتراق جهت استفاده در کاربردهای مختلف صنعتی آغاز گردد[۱]. با توجه به استفاده از اکسیژن خالص در این فرآیند احتراقی، دما به میزان قابل توجهی افزایش می‌یابد که این موضوع چالش‌های عمده‌ای از قبیل نیاز به تغییرات اساسی در کوره‌های سوخت- هوای فعلی و همچنین عدم استفاده از این احتراق در تمامی کاربردها را به دنبال دارد. از این‌رو و به‌منظور بر طرف کردن این چالش‌ها در فرآیند احتراق سوخت-اکسیژن از بازچرخش محصولات حاصل از این احتراق که به صورت عمده شامل دی‌اکسید کربن و بخار آب می‌شوند، استفاده شده است[۱]. تزریق دی اکسیدکربن می‌تواند اثرات فیزیکی و شیمیایی مختلفی را منجر گردد. تاثیر فیزیکی تزریق CO_2 شامل تغییرخواص دمایی و تشعشعی گازها درون محفظه‌ی احتراق می‌شود و تاثیر شیمیایی تزریق CO_2، به علت شرکت کردن این گاز در واکنش‌های احتراقی و تغییر سینتیک این واکنش‌ها است.

همچنین تزریق CO_2 درون محفظه‌ی احتراق موجب افزایش غلظت این گاز می‌شود. گاز دی‌اکسیدکربن ظرفیت گرمایی ویژه بالاتری نسبت به گاز نیتروژن دارد. بنابراین گرمای ناشی از احتراق بیشتری نسبت به گاز نیتروژن در خود جذب می‌کند. در نتیجه در شرایط یکسان، احتراق در محیط متان-اکسیژن (O_2, CO_2) نسبت به احتراق در محیط هوا-سوخت (O_2, N_2) دمای پایین‌تری دارد. بنابراین می‌توان گفت که تزریق دی‌اکسیدکربن سبب کاهش شدت واکنش‌های احتراق و دمای شعله می‌شود. افزایش تزریق دی‌اکسیدکربن ممکن است موجب خاموشی شعله شود. که این موضوع سبب شده تا مطالعات گوناگونی در زمینه آن صورت گیرد.[۲] مطالعه عددی برروی اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 بر احتراق سوخت- اکسیژن با استفاده از حل یک بعدی شعله جریان متقابل در مطالعات گوناگونی گزارش شده است.

گلوربورگ و بنتزن [۲] در سال ۲۰۰۷، تاثیر شیمیایی تزریق CO_2 در یک راکتور جریان با فشار اتمسفر[1] در احتراق اکسیژن-متان را به صورت آزمایشگاهی مطالعه کردند. آن‌ها با استفاده از نرم افزار کمکین و نتایج آزمایشگاهی، سینتیکی برای احتراق اکسیژن-متان ارائه کردند این سینتیک به طور خاص برای تبدیل بین مونوکسیدکربن و دی‌اکسیدکربن (CO/CO_2)

[1]atmospheric-pressure flow reactor

ارائه شده است. هدف از این کار اصلاح طرح احتراق فاز گاز در احتراق متان-اکسیژن و شناسایی واکنش‌های درگیر در اثر حضور دی‌اکسیدکربن می‌باشد. آن‌ها نتیجه گرفتند که تزریق CO_2 به احتراق متان-اکسیژن باعث افزایش غلظت مونوکسیدکربن در ناحیه نزدیک شعله می‌شود. دی‌اکسیدکربن گازی نسبتا بی اثر است و از آنجا که پیوند کربن با اکسیژن از نوع پیوند دوگانه کووالانسی[1] است تنها در دمای بالا یا در حضور رادیکال‌های آزاد فعال که موجب شکستن پیوند بین اتم‌های آن می‌شود، در واکنش‌ها شرکت می‌کند. تجزیه‌ی دمایی دی‌اکسیدکربن به شدت گرماگیر است و در دمای بالا رخ می‌دهد. واکنش دی‌اکسیدکربن با رادیکال‌های آزاد ممکن است در دمای پایین نیز اتفاق بیافتد. مهم‌ترین واکنشی که سبب تحزیه‌ی CO_2 و تشکیل مونوکسیدکربن می‌شود واکنش با رادیکال هیدروژن است که در دمای پایین نیز رخ می‌دهد. لیو و همکارانش [۳] در سال ۲۰۱۳، به مطالعه‌ی عددی تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 و H_2O، برروی ساختار شعله متان با استفاده از شعله نفوذی جریان متقابل پرداختند؛ آن‌ها در این مطالعه تاثیر تزریق کسر مولی‌های متفاوت CO_2 و H_2O، بر روی دمای شعله و شاخص انتشار مونوکسیدکربن بررسی کردند. آن‌ها نتیجه گرفتند که تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2، باعث کاهش دمای شعله می‌شود ولی تاثیر شیمیایی و فیزیکی تزریق H_2O، برروی دمای شعله یکدیگر را تقریبا خنثی می‌کنند. همچنین تاثیر شیمیایی تزریق CO_2، باعث افزایش قابل توجهی در شاخص انتشار مونوکسیدکربن به علت تجزیه‌ی این گاز می‌شود در صورتی که تاثیر شیمیایی افزودن H_2O، باعث کاهش شاخص انتشار مونوکسیدکربن به علت کاهش رادیکال H و افزایش رادیکال OH می‌شود. تاثیر شیمیایی تزریق دی‌اکسیدکربن در تشکیل مونوکسیدکربن از طریق آنالیز ترمودینامیکی و شبیه‌سازی یک بعدی شعله نفوذی جریان متقابل با استفاده از سینتیک مفصل توسط چن و همکارانش [۴] در سال ۲۰۱۴ انجام گرفت. نتایج حاصل از شبیه‌سازی یک بعدی نشان می‌دهد که واکنش دی‌اکسیدکربن با رادیکال هیدروژن عامل اصلی شکل‌گیری مونوکسیدکربن می‌باشد. آن‌ها با مقایسه میزان انتشار مونوکسیدکربن در احتراق سوخت-اکسیژن با سوخت-هوا نتیجه گرفتند که کسر مولی مونوکسیدکربن تابعی از دما و نسبت استوکیومتری است. دنیل کوهنمیت و همکارانش [۵] در سال ۲۰۱۴، به مطالعه سینتیک‌های شکل‌گیری مونوکسیدکربن تحت شرایط احتراق متان-اکسیژن پرداختند؛ آن‌ها در این مطالعه انتشار مونوکسیدکربن در سوخت‌های گازی را با سوخت زغال سنگ مقایسه‌کردند. نتیجه بدست آمده از این مطالعه حاکی از آن دارد که در ناحیه شعله، دی‌اکسیدکربن ممکن است تجزیه شود و موجب شکل‌گیری مونوکسیدکربن شود؛ بنابراین در احتراق متان-اکسیژن کربن موجود در سوخت تنها منبع شکل‌گیری مونوکسیدکربن نیست. تجزیه‌ی حرارتی دی‌اکسیدکربن به طور کلی در دمای بالا اهمیت پیدا می‌کند (میزان تجزیه‌ی حرارتی دی‌اکسیدکربن در دمای ۲۰۰۰ کلوین در حدود ۱٪ است). بنابراین انتظار می‌رود که دو واکنش اصلی شکل‌گیری مونوکسیدکربن واکنش گاز دی‌اکسیدکربن با رادیکال هیدروژن و واکنش دی‌اکسیدکربن با رادیکال‌های هیدروکربنی مانند $CH_{1,2}$ می‌باشد. همچنین میزان مونوکسیدکربن تشکیل شده در سوخت‌های گازی نسبت به سوخت زغال‌سنگ بیشتر است و علت آن نسبت کربن به هیدروژن کوچکتر در سوخت می‌باشد. ژانگ و همکارانش [۶] در سال ۲۰۱۵، به مطالعه‌ی تاثیر شیمیایی تزریق CO_2، در کسر جرمی‌های مختلف برروی دمای احتراق در احتراق اکسیژن-متان با استفاده از حلگر جریان متقابل پرداختند. بدین منظور از یک گونه‌ی مصنوعی با نام X، که خواص فیزیکی مشابهی با CO_2 دارد ولی از نظر شیمیایی بی اثر است استفاده کردند. آن‌ها با مقایسه‌ی احتراق متان در اتمسفر ($X-O_2$) و احتراق در اتمسفر(O_2-CO_2)، تاثیر شیمیایی تزریق CO_2، را مطالعه کردند. نتایج نشان می‌دهند که تاثیر شیمیایی CO_2، به تدریج با افزایش کسر مولی O_2 از ۲۰٪ تا ۲۸٪ افزایش پیدا می‌کند. و در بین ۲۸٪ تا ۳۲٪ این تاثیر ثابت می‌ماند. در نهایت با افزایش کسر مولی O_2 از ۳۶٪ تا ۵۰٪، تاثیر شیمیایی تزریق CO_2، به تدریج کاهش می‌یابد. علاوه‌براین دو واکنش کلیدی احتراق در احتراق سوخت-اکسیژن واکنش R38 ($H+O_2=O+OH$) و واکنش R35 ($H+O_2+H_2O=H_2O+HO_2$) هستند که تزریق CO_2، در کسر مولی O_2 از ۲۰٪ تا ۲۴٪ و از ۲۶٪ تا ۵۰٪ باعث کاهش شدت این دو واکنش می‌شود.

مطالعه‌ی حاضر از آن جهت اهمیت دارد که با توجه به اینکه در سینتیک‌های کاهش یافته واکنش‌های تجزیه CO_2، در نظر گرفته نمی‌شود(در سینتیک دو و چهار مرحله‌ای تنها یک واکنش مربوط به تجزیه‌ی CO_2، وجود دارد) و با توجه به اینکه اثر فیزیکی تزریق CO_2، در تمام سینتیک‌ها در نظر گرفته می‌شود بنابراین می‌توان با بررسی تاثیر شیمیایی تزریق CO_2 نقش واکنش‌های تجزیه را در کسر جرمی‌های مختلف تزریق با یکدیگر مقایسه کرد در واقع در کسر جرمی‌های تزریقی که نقش اثر شیمیایی کم و نقش اثر فیزیکی زیاد است سینتیک‌های کاهش یافته جواب دقیق‌تری می‌دهند.

مشخصات محفظه احتراق یک بعدی و مباحث عددی

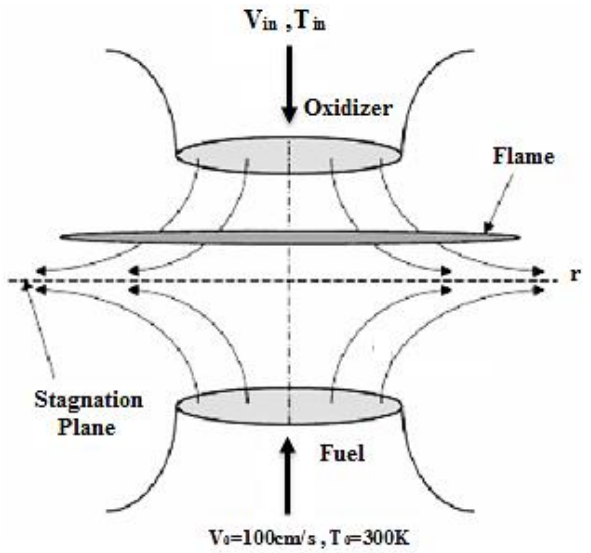
جهت بررسی اثرات شیمیایی و فیزیکی تزریق دی اکسیدکربن درون اکسیدکننده روی میزان مونوکسید کربن تولید شده، از نرم افزار کمکین و مسئله شعله نفوذی جریان متقابل مطابق شکل (۱) استفاده می‌شود. در این هندسه، دو نازل سوخت و اکسیدکننده روبروی هم قرار دارند و سوخت و اکسیدکننده از دو نازل به سمت یکدیگر پاشش می‌شوند و در فاصله‌ی بین دو نازل سوخت و اکسیدکننده شعله تشکیل می‌شود. فاصله‌ی بین نازل‌های سوخت و اکسیدکننده در مطالعه‌ی حاضر ۲ سانتی‌متر در نظر گرفته شده‌است. این هندسه منجر به ایجاد یک صفحه سکون بین دو نازل سوخت و اکسیدکننده می‌گردد که محل آن با توجه به شرایط مرزی سوخت و اکسیدکننده تعیین می‌شود. درمساله‌ی حاضر سرعت مخلوط اکسیدکننده

[1] Covalent double bond

به گونه‌ای محاسبه شده تا صفحه سکون شعله در ناحیه میانی دو جریان قرار گیرد؛ این کار با برابر قرار دادن مومنتوم در جریان سوخت و اکسید کننده انجام شده است. سرعت ورودی اکسیدکننده (u_i) با استفاده از رابطه (۱) محاسبه می‌شود:

$$\rho_i u_i^2 = \sum Y_i \rho_i u_o^2 \qquad (۱)$$

سینتیک مورد استفاده در این شبیه‌سازی سینتیک کامل احتراق متان (GRI3.0) [۷]،شامل ۵۳ گونه و ۳۲۵ واکنش برای شبیه‌سازی‌ها می‌باشد.



شکل ۱: صفحه سکون و شرایط مرزی برای شعله نفوذی جریان متقابل

معادلات حاکم

در این بخش به بیان معادلات حاکم بر حلگر شعله نفوذی جریان متقابل که درآن جریان سوخت و اکسیدکننده از ورودی‌های کاملا مجزا و مقابل یکدیگر وارد می‌شوند، پرداخته می‌شود. در این حالت با استفاده از انتقال تشابهی، میدان جریان متقارن محوری قابل‌حل می‌باشد. حل تشابهی میدان حل را در هندسه‌ی متقارن محوری و نیز در هندسه‌ی دوبعدی صفحه‌ای به یک مساله یک‌بعدی کاهش می‌دهد. دراین حالت حل تشابهی فرض می‌نماید که مولفه شعاعی سرعت خطی بوده و سایر متغیرهای وابسته جریان تنها تابعی از جهت محوری می‌باشند. برای بیان معادلات با توجه به فرضیات بیان شده نیاز به تعریف دو متغیر تشابهی می‌باشد که مطابق معادله‌ی (۳) تعریف می‌شود. در حالت پایا معادله‌ی بقای جرم در مختصات استوانه‌ای به صورت زیر نوشته می‌شود[۸].

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho v r) = 0 \qquad (۲)$$

$$G(x) = -\frac{\rho v}{r} \quad and \quad F(x) = \frac{\rho u}{2} \qquad (۳)$$

که با جایگذاری دو متغیر در معادله‌ی پیوستگی داریم:

$$G(x) = \frac{dF(x)}{dx} \qquad (۴)$$

همچنین برای بیان روابط به شکلی ساده‌تر نیاز به در نظر گرفتن یک مقدار ویژه می‌باشد که این مقدار ویژه مطابق رابطه (۵) تعریف می‌شود.

$$H = \frac{1}{r}\frac{\partial p}{\partial r} = \text{constant} \qquad (۵)$$

معادلات مومنتم، انرژی و بقای گونه با اعمال متغیرهای تشابهی و تابع ویژه در نظر گرفته شده به صورت معادلات (۶) تا (۸) تعریف می‌شوند.

- مومنتوم محوری:

$$H - 2\frac{d}{dx}\left(\frac{FG}{\rho}\right) + 3\frac{G^2}{\rho} + \frac{d}{dx}\left(\mu\frac{d}{dr}\left(\frac{G}{\rho}\right)\right) = 0 \qquad (۶)$$

- انرژی:

$$\rho u\frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_p}\frac{d}{dx}\left(\lambda\frac{dT}{dx}\right) + \frac{\rho}{c_p}\sum_k c_{p.k}Y_k V_k\frac{dT}{dx} + \frac{1}{c_p}\sum_k h_k\dot{\omega}_k = 0 \qquad (۷)$$

- بقای گونه:

$$\rho u\frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx}(\rho Y_k V_k) - \dot{\omega}_k W_k = 0\,, \quad k = 1.2.\ \cdots.\mathrm{K} \qquad (۸)$$

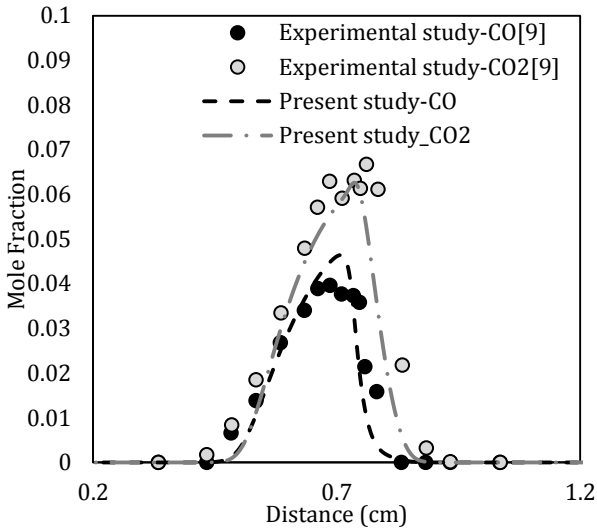
که مقدار سرعت نفوذی در معادلات بالا از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$V_k = \frac{-1}{X_k}D_{km}\frac{dX_k}{dx} - \frac{D_k^{Th}}{\rho Y_k}\frac{dT}{dx} \quad where \quad D_{km} = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j\neq k}^{K}\frac{X_j}{D_{jk}}} \qquad (۹)$$

اعتبارسنجی حلگر یک‌بعدی

به منظور اعتبارسنجی حلگر مورد استفاده از نتایج آزمایشگاهی مربوط به مرجع [۹] که مربوط به احتراق متان در شرایط سوخت-هوا می‌باشد، استفاده شده است. بدین منظور با توجه به کار تجربی انجام شده، فاصله نازل‌های سوخت و هوا برابر با 1.2 سانتی متر در نظر گرفته شده است. سرعت جریان سوخت برابر با 70 سانتی‌متر بر ثانیه می‌باشد.

شکل (۲) مقایسه میان توزیع گونه‌های دی‌اکسیدکربن، و مونوکسیدکربن در میدان حل را نشان می‌دهد.



شکل ۲: اعتبارسنجی حلگر با داده‌های تجربی مرجع [۹] (خطوط نشان دهنده داده‌های بدست آمده از شبیه‌سازی عددی و علائم بیانگر داده‌های تجربی هستند)

همان‌گونه که مشاهده می‌شود نتایج بدست آمده از حلگر شعله نفوذی جریان متقابل تطابق بسیار خوبی با داده‌های تجربی داشته که این موضوع بیانگر معتبر بودن شرایط در نظر گرفته شده برای حلگر مورد استفاده می‌باشد.

نتایج حاصل از تزریق مقادیر مختلف CO_2 درون اکسیدکننده

در این بخش به بررسی تاثیر تزریق مقادیر مختلف CO_2 درون اکسیدکننده بر توزیع دما و مشخصه انتشار آلاینده مونوکسید کربن پرداخته می‌شود و نتایج بدست آمده با نتایج احتراق سوخت-اکسیژن بدون تزریق CO_2 مقایسه می‌شود. بدین منظور از تزریق جرمی مقادیر، 30، 50 و 70 درصدی CO_2 به جای O_2 درون اکسیدکننده استفاده شده است. در بررسی‌ها از شاخص انتشار مونوکسیدکربن (EICO[1]) که بیانگر میزان مونوکسیدکربن تولید شده بر کیلوگرم سوخت مصرفی می‌باشد، استفاده شده است. مقدار شاخص انتشار مونوکسیدکربن از رابطه (۱۰) محاسبه می‌شود [۱۰]:

$$EI_{CO}(x) = \frac{\int_0^x \dot{\omega}_{CO}(l) W_{CO} dl}{-\int_0^x \dot{\omega}_{fuel}(l) W_{fuel} dl} \times 1000 \left[{}^{gCO}/_{kgfuel}\right] \qquad (۱۰)$$

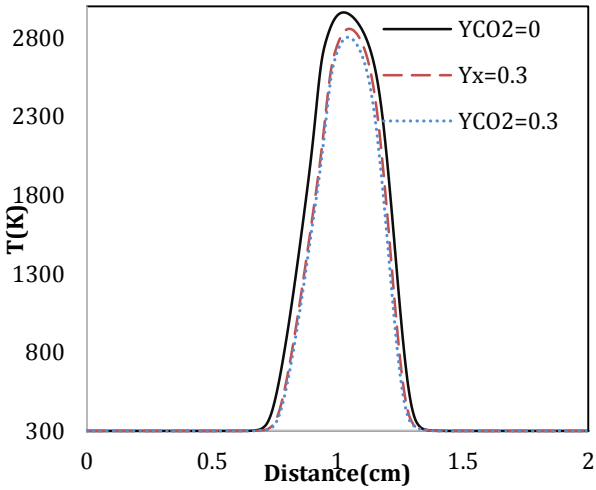
هدف از این بخش مقایسه سهم تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 بر روی مونوکسیدکربن و توزیع دما است. تزریق CO_2 به دو صورت فیزیکی و شیمیایی برروی احتراق تاثیر می‌گذارد. تاثیر فیزیکی تزریق CO_2 به‌علت تغییر در ظرفیت حرارتی و خواص تشعشعی این گاز می‌باشد و تاثیر شیمیایی تزریق CO_2 به علت شرکت کردن این گاز در واکنش‌های احتراقی و تغییر سینتیک این واکنش‌ها است. بدین منظور در این مطالعه از گونه‌ی X، استفاده شده‌است. گونه‌ی X یک گونه‌ی مصنوعی است که به سینتیک GRI 3.0 اضافه شده‌است. گونه‌ی مصنوعی X، خواص ترمودینامیکی، انتقالی و تشعشعی مشابهی با CO_2 داشته اما در واکنش‌های شیمیایی شرکت نمی‌کند. بنابراین در این شرایط گونه X به عنوان یک گونه خنثی در واکنش‌های شیمیایی شرکت کرده و تنها شامل اثرات فیزیکی می‌شود. نتایج بدست آمده از مطالعه حاضر بیانگر اثرات قابل توجه شیمیایی تزریق CO_2 بر توزیع دما و اهمیت واکنش‌های شیمیایی در بردارنده آن در شرایط تزریق می‌باشد.

با مقایسه حالتی که در جریان اکسیدکننده تنها اکسیژن خالص استفاده می‌شود با حالتی که در جریان اکسیدکننده گونه‌ی مصنوعی X وجود دارد به مطالعه‌ی تاثیر فیزیکی تزریق CO_2 در کسرجرمی‌های مختلف پرداخته شده‌است و به‌منظور بررسی تاثیر شیمیایی، حالتی که در جریان اکسیدکننده X تزریق می‌شود را باید با حالتی که در جریان اکسیدکننده CO_2 تزریق می‌شود، مقایسه کرد. در جدول (۱) شرایط مختلف ترکیب اکسیدکننده برای مقایسه تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 آورده شده است.

جدول ۱: مقادیر بیشینه دما در حالات مختلف بررسی تزریق CO_2 و گونه خنثی X

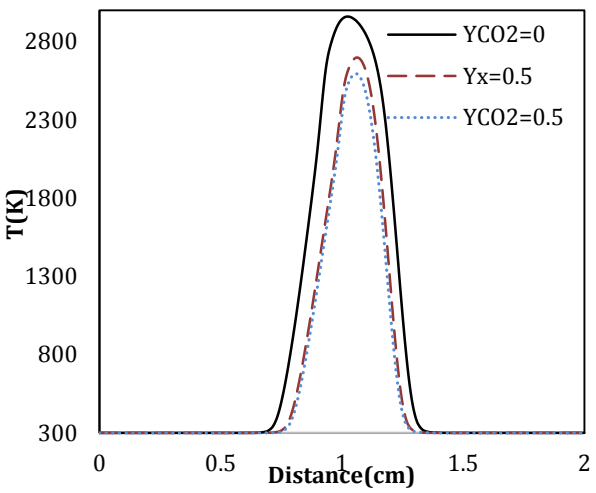
شماره	درصد گونه‌ها	شماره	درصد گونه‌ها
۱	O_2=70, X=30,	۲	O_2=70, CO_2=30,
۳	O_2=50, X=50,	۴	O_2=50, CO_2=50,
۵	O_2=30, X=70,	۶	O_2=30, CO_2=70,

در شکل های (۳) و (۴) و (۵) مقایسه اثر فیزیکی و شیمیایی در کسرجرمی‌های مختلف تزریق CO_2 در جریان اکسیدکننده برروی توزیع دما نشان داده شده‌است.



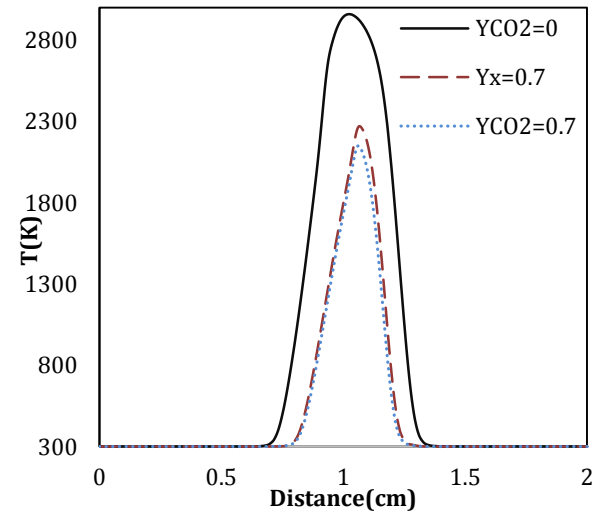
شکل ۳: مقایسه‌ی تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 بر توزیع دما در YCO_2=0.3

[1] Emission Indices Carbon monoxide



شکل ۴: مقایسه‌ی تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 بر توزیع دما در YCO_2=0.5

در شکل های (۳) و (۴) و (۵) مقایسه سهم مربوط به تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 برروی مقدار کاهش دمای بیشینه نشان داده شده‌است. همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش تزریق CO_2، دما به علت ظرفیت حرارتی بالای این گاز نسبت به اکسیژن، کاهش می‌یابد و تاثیر شیمیایی تزریق CO_2 به علت کاهش واکنش‌های تجزیه کاهش می‌یابد در جدول (۲) مقادیر بیشینه دما در حالات مختلف تزریق ارائه شده‌است با توجه به مقادیر بیشینه دما در جدول (۲) می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش درصد تزریق CO_2، افزایش سهم تاثیر فیزیکی بیشتر از افزایش سهم تاثیر شیمیایی است.



شکل ۵: مقایسه‌ی تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 بر توزیع دما در YCO_2=0.7

جدول ۲: مقادیر بیشینه دما در حالات مختلف بررسی تزریق گونه CO_2 و گونه خنثی X

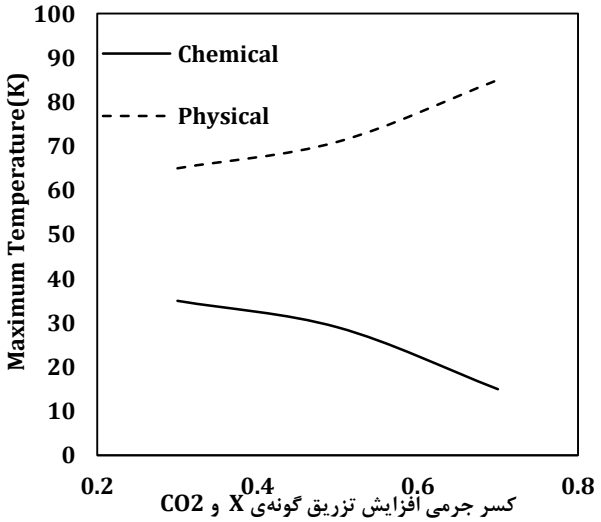
درصدجرمی گونه‌ها	Tmax	درصد جرمی گونه‌ها	Tmax
O2=70, X=30,	2856.3	O2=70, CO2=30,	2802.4
O2=50, X=50,	2698.1	O2=50, CO2=50,	2595.1
O2=30, X=70,	2270.9	O2=30, CO2=70,	2150.1

در شکل (۶) مقدار سهم فیزیکی وشیمیایی تزریق CO_2 در کاهش دمای بیشینه در سه کسر جرمی۰٫۳ و ۰٫۵ و ۰٫۷ با یکدیگر مقایسه شده است. سهم مربوط به تاثیر فیزیکی و شیمیایی به ترتیب با استفاده از رابطه‌ی (۱۱) و (۱۲) محاسبه می‌شود. که در آن a میزان اختلاف عدد مشخصه(در اینجا دمای بیشینه) در حالت تزریق گونه‌ی مصنوعی X نسبت به حالت بدون تزریق($YCO_2 = 0$) و b میزان اختلاف عدد مشخصه در حالت تزریق گونه‌ی مصنوعی X نسبت به حالت تزریق گونه‌ی CO_2 می‌باشد.

$$\text{Phisical} = \frac{a}{a+b} * 100 \qquad (۱۱)$$

$$\text{Chemical} = \frac{b}{a+b} * 100 \qquad (۱۲)$$

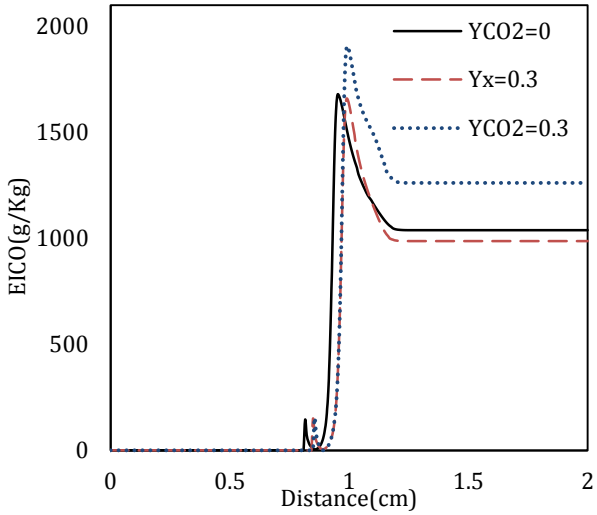
هماطور که در شکل (۶) نشان داده شده است با افزایش درصد تزریق دی‌اکسیدکربن سهم تاثیر فیزیکی تزریق برروی کاهش دمای ماکزیمم به علت بالا بودن ظرفیت حرارتی CO_2 افزایش می‌یابد و در نتیجه با کاهش دما تجزیه‌ی گاز CO_2، کاهش می‌یابد به عبارت دیگر با افزایش درصد تزریق گاز CO_2، اثر فیزیکی وشیمیایی تزریق CO_2، افزایش می‌یابد و این افزایش برای اثر فیزیکی بیشتر است.



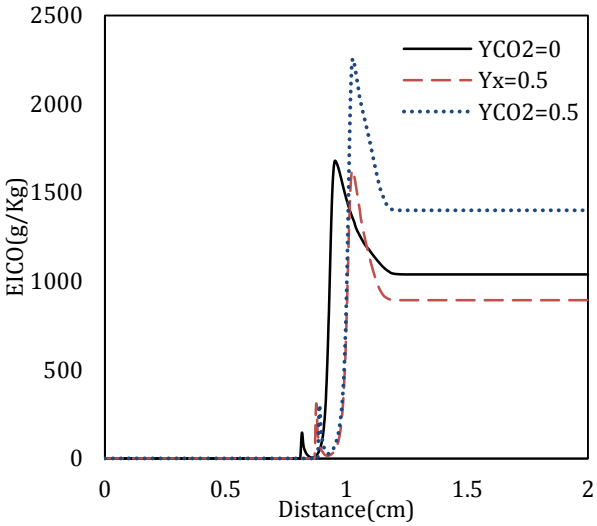
شکل ۶: مقایسه مربوط به درصد سهم اثر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 در سه کسر جرمی ۰٫۳و۰٫۵و۰٫۷ برروی توزیع دما

در شکل‌های (۷) و (۸) و (۹) مقایسه اثر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 درون جریان اکسیدکننده در سه کسر جرمی ۰٫۳ و ۰٫۵ و ۰٫۷ بر روی شاخص انتشار مونوکسیدکربن نشان داده شده‌است. با توجه به شکل‌های (۶) و (۷) و (۸) مشاهده می‌شود که مقدار شاخص انتشار مونوکسیدکربن در حالت تزریق CO_2، نسبت به گونه‌ی مصنوعی X، بالاتر است؛ این موضوع نشان‌دهنده‌ی اهمیت تجزیه‌ی CO_2، در تولید مونوکسیدکربن می‌باشد. مشاهده می‌شود که با افزایش درصد جرمی تزریق گونه‌ی مصنوعی X در

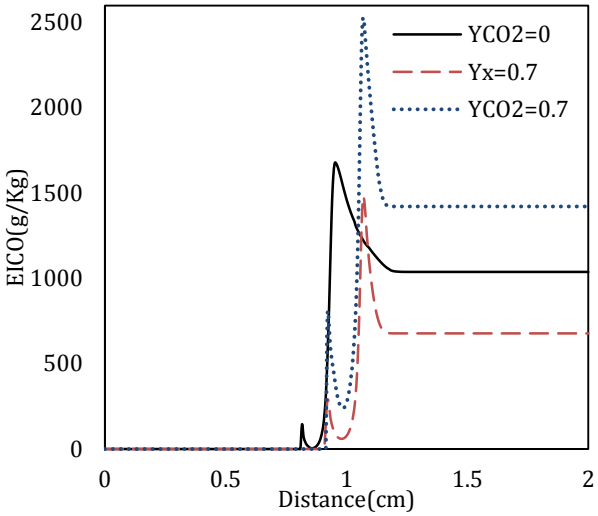
جریان اکسیدکننده میزان کاهش شاخص انتشار مونوکسیدکربن به علت کاهش دما و کاهش واکنش‌های تجزیه نسبت به حالت بدون تزریق(YO_2=1) افزایش می‌یابد (تاثیر فیزیکی). همچنین با افزایش درصد جرمی تزریق گونه‌ی CO_2 میزان شاخص انتشار مونوکسیدکربن به علت افزایش غلظت CO_2 و افزایش واکنش‌های تجزیه نسبت به حالت تزریق گونه‌ی مصنوعی X نیز افزایش می‌یابد(تاثیر شیمیایی).



شکل ۷: مقایسه‌ی تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 بر توزیع دما در YCO_2=0.3



شکل ۸: مقایسه‌ی تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 بر توزیع دما در YCO_2=0.5



شکل ۹: مقایسه‌ی تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 بر توزیع دما در YCO_2=0.7

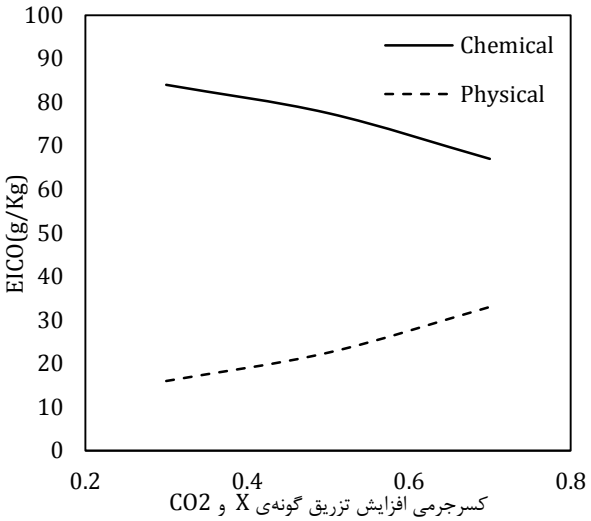
با مقایسه‌ی واکنش‌های تجزیه‌ی CO2 می‌توان نتیجه گرفت که علت اصلی افزایش تولید CO در اثر تزریق CO2، سرعت گرفتن واکنش تجزیه‌ی CO2 با رادیکال هیدروژن مطابق واکنش $(CO_2 + H \Leftrightarrow OH + CO)$ تحت شرایط احتراق سوخت-اکسیژن می‌باشد.

جدول ۳: مقادیر شاخص انتشار مونوکسیدکربن در حالات مختلف بررسی تزریق CO_2 و گونه خنثی X

EICO(g/Kg)	درصد جرمی گونه‌ها	EICO(g/Kg)	درصد جرمی گونه‌ها
273	O_2=70, CO_2=30,	53	O_2=70, X=30,
507	O_2=50, CO_2=50,	147	O_2=50, X=50,
742	O_2=30, CO_2=70,	362	O_2=30, X=70,

در جدول (۳) مقادیر شاخص انتشار مونوکسیدکربن در درصدهای مختلف تزریق ارائه شده‌است. با توجه به این مقادیر می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش درصد تزریق سهم تاثیر فیزیکی نسبت به سهم تاثیر شیمیایی بیشتر افزایش می‌یابد.

درصد سهم مربوط به کاهش اختلاف دما برای دو حالت تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 در شکل (۱۰) نشان داده شده‌است. همانطور که در این شکل نیز مشخص است با افزایش درصد تزریق، سهم تاثیر فیزیکی افزایش و سهم تاثیر شیمیایی کاهش می‌یابد.



شکل ۱۰: مقایسه مربوط به درصد سهم اثر فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 در سه کسر جرمی ۰٫۳و ۰٫۵و ۰٫۷ برروی توزیع دما

نتیجه گیری

در این مطالعه با استفاده از حلگر شعله نفوذی جریان متقابل در نرم‌افزار کمکین به بررسی تاثیر تزریق CO_2 در جریان اکسیدکننده در احتراق اکسیژن-متان پرداخته شد. هدف از این مطالعه مقایسه و بررسی تاثیر فیزیکی وشیمیایی تزریق CO_2 برروی تولیدمونوکسیدکربن و توزیع دما در احتراق اکسیژن-متان می‌باشد. به‌منظور انجام این مطالعه یک ماده‌ی مصنوعی به نام X و با مشخصات فیزیکی مشابه با CO_2 ولی از نظر شیمیایی خنثی در نظرگرفته شد.

نتایج نشان داد که تاثیر فیزیکی تزریق CO_2 باعث کاهش ماکزیمم دما به علت ظرفیت حرارتی بالای این گاز می‌شود همچنین تاثیر شیمیایی نیز باعث کاهش دمای شعله به علت تجزیه‌ی گاز CO_2 می‌شود. درادامه به بررسی شاخص انتشار مونوکسیدکربن پرداخته شد و مشاهده شد که تاثیر فیزیکی باعث کاهش شاخص انتشار مونوکسیدکربن به علت کاهش دما و کاهش تجزیه‌ی CO_2 می‌شود و اثر شیمیایی باعث افزایش شاخص انتشار مونوکسیدکربن به علت شرکت این گاز در واکنش‌های شیمیایی و تولید مونوکسیدکربن می‌شود. با بررسی کسرجرمی‌های مختلف تزریق مشاهده شد که با افزایش میزان CO_2 تزریق شده به محفظه احتراق نقش تاثیر فیزیکی افزایش و نقش تاثیر شیمیایی کاهش می‌یابد. بنابراین در شرایطی که به علت هزینه محاسباتی بالا از سینتیک های کاهش یافته استفاده می‌شود. در نظر گرفتن واکنش‌هایی که موجب تجزیه‌ی CO_2 می‌شوند و می‌توانند منجر به کاهش دما و افزایش تولید مونوکسیدکربن شوند از اهمیت بالایی برخوردار است.

مراجع

[1] Zheng, L. *Oxy-fuel combustion for power generation and carbon dioxide (CO2) capture*. Elsevier, 2011.

[2] Glarborg, P. and Bentzen, L.L. "Chemical effects of a high CO2 concentration in oxy-fuel combustion of methane." *Energy & Fuels*, 22(1), 2007, pp. 291-296.

[3] Wang, L., Liu, Z., Chen, S., Zheng, C. and Li, J. "Physical and chemical effects of CO2 and H2O additives on counterflow diffusion flame burning methane." *Energy & fuels*, 27(12), 2013, pp.7602-7611.

[4] Chen, L. and Ghoniem, A.F. "Modeling CO2 Chemical Effects on CO Formation in Oxy-Fuel Diffusion Flames Using Detailed, Quasi-Global, and Global Reaction Mechanisms." *Combustion Science and Technology*, 186(7), 2014, pp. 829-848.

[5] Kühnemuth, D., Normann, F., Andersson, K. and Johnsson, F. "On the carbon monoxide formation in oxy-fuel combustion—Contribution by homogenous and heterogeneous reactions." *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 25, 2014, pp. 33-41.

[6] Song, Yu, Chun Zou, Yizhuo He, and Chuguagn Zheng. "The chemical mechanism of the effect of CO 2 on the temperature in methane oxy-fuel combustion." *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 86, 2015, pp. 622-628.

[7]http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html (visited at. 2016 February)

[8] Lutz AE, Kee RJ, Grcar JF, Rupley FM. OPPDIF: A Fortran program for computing opposed-flow diffusion flames. Sandia National Labs., Livermore, CA (United States); 1997.

[9] Lim, J., Gore, J. and Viskanta, R. "A study of the effects of air preheat on the structure of methane/air counterflow diffusion flames." *Combustion and Flame*, 121(1), 2000, pp. 262-274.

[10]"ANSYS CHEMKIN THEORY MANUAL 17.0" ANSYS Reaction Design: San Diego, 2016.