

مطالعه تأثیر رقیق سازی سوخت در شعله های نفوذی متان/هوا بر میزان انتشار آلاینده های زیست محیطی

چکیده: هرگاه احتراق غیر پیش آمیخته، حاصل دو جریان مختلف الجهد سوخت و اکسیدکننده باشد به آن شعله جریان مخالف نفوذی گفته می شود. هدف اصلی در پژوهش حاضر، بررسی اثر گاز آرگون به عنوان رقیق کننده بر شعله جریان مخالف نفوذی متان و میزان انتشار آلاینده هایی مانند NO_x ، CO و دوده است. شبیه سازی عددی به کمک نرم افزار شبیه ساز احتراق کمکین انجام گردید. جمله نفوذ به کمک روش تفاضل مرکزی با خطای مرتبه دو منفصل گردید. برای ایجاد همگرایی بیشتر در انفصال جمله جابجایی از روش بالا دست که قادر به تشخیص جهت جریان است، استفاده شد. معادلات منفصل شده به کمک حلگر دو نقطه ای با انتگرال گیری زمانی حل گردید. نتایج نشان می دهند که افزایش میزان رقیق کننده منجر به کاهش ماکزیمم دما و کسر مولی رادیکال های فعال از جمله رادیکال H می شود. کاهش رادیکال فعال H باعث می شود که سوخت، کمتر تحت تأثیر این گونه قرار گرفته و بنابراین نفوذ بیشتری در سمت اکسید کننده داشته باشد. انتشار گونه های NO ، NO_2 ، C_2H_2 و CO که جزء آلاینده های زیست محیطی می باشند و برای سلامتی مضر هستند، با افزایش درصد رقیق کننده به طور میانگین تا ۳۲/۲۵٪ کاهش می یابند که این موضوع از دیدگاه کنترل آلودگی هوا و موضوعات مربوط به راندمان احتراق دارای اهمیت فراوانی است.

واژه های راهنما: شعله های جریان مخالف نفوذی، آلاینده زیست محیطی، رقیق کننده، متان

علی اسدی*

استادیار،
گروه مهندسی مکانیک،
دانشکده مهندسی،
دانشگاه بزرگمهر قائنات،
قائن

میترا یادگاری

استادیار،
گروه مهندسی مکانیک،
دانشکده مکانیک و عمران،
دانشگاه صنعتی اسفراین،
اسفراین

مقاله علمی پژوهشی

دریافت: ۱۴۰۳/۰۱/۰۸

بازنگری: ۱۴۰۳/۰۵/۰۸

پذیرش: ۱۴۰۳/۰۵/۱۶

The study of the effect of fuel dilution in methane/air counterflow diffusion flames on the emission of environmental pollutants

Ali Asadi*
Assistant Professor,
Department of Mechanical
Engineering, Faculty of
Engineering,
Bozorgmehr University of
Qaenat, Qaen

Mitra Yadegari
Assistant Professor,
Department of Mechanical
Engineering, Faculty of
Mechanics and Civil
Engineering, Esfarayen
University of Technology,
.Esfarayen

Abstract: When the non-premixed combustion is the result of two different streams of fuel and oxidizer, it is called a counterflow diffusion flame. The main goal of the current work is to investigate the effect of Argon gas as a diluent on the counterflow diffusion flame and the amount of emission of pollutants such as NO_x , CO and soot. Numerical simulation was done with the help of CHEMKIN combustion simulator software. The diffusion term was discretized using the central difference method with a second-order error. In order to more convergence in the discretization of convection term, the upwind method, which is able to detect the flow direction, was used. The discretized equations were solved using a two-point solver with time integration. The results show that increasing the amount of diluent leads to a decrease in the maximum temperature as well as a decrease in the maximum mole fraction of active radicals, including H radical. The reduction of the active radical H makes the fuel less affected by this species and therefore has more diffuses on the oxidizing side. The emission of NO ، NO_2 ، C_2H_2 and CO species, which are part of environmental pollutants and are harmful to health, are reduced by an average of 25.32% with the increase of diluent percentage, which is very important from the point of view of air pollution control and issues related to combustion efficiency.

Keywords: Counterflow diffusion flames, Environmental pollutants, Diluent, Methane

۱- مقدمه

شکل‌گیری NO_x در شعله‌های جریان مخالف نفوذی متان/هوا روش آن‌ها را برای هر دو حالت فرایند پایدار و گذرا تایید کرد.

ژنگ و همکاران [۷] حساسیت تشکیل دوده به تغییرات نرخ کرنش را به صورت تجربی و عددی برای شعله‌های جریان مخالف چهارده آلکان و الکل C3-C5 مورد مطالعه قرار دادند. نتایج آن‌ها نشان داد که افزایش نرخ کرنش منجر به کاهش کسر حجمی دوده در تمام شعله‌های آزمایش می‌شود. همچنین آن‌ها مشاهده کردند که به جز ترت بوتانول و ترت پنتانول، حساسیت کسر حجمی دوده به نرخ کرنش برای سوخت‌هایی با تمایل دوده‌گیری بالاتر، کمتر است.

فنگ و همکاران [۸] اثرات افزودن آمونیاک در جریان سوخت یک شعله‌ی جریان مخالف نفوذی اتیلن بر ویژگی‌های تشکیل دوده را به صورت عددی مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها از روش جداسازی متعامد برای مطالعه‌ی کامل اثرات رقیق‌سازی، شیمیایی و حرارتی آمونیاک اضافه شده استفاده کردند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که کسر حجمی دوده‌ی شعله، تحت تأثیر رقیق‌سازی، شیمیایی و حرارتی آمونیاک کاهش می‌یابد. بیشترین تأثیر به ترتیب مربوط به اثر شیمیایی و رقیق‌سازی و کمترین تأثیر مربوط به اثر حرارتی است.

با توجه به نقش‌های ساختمانی شیمی مرتبط با متان در مکانیزم‌های ساختاری سلسله مراتبی فعلی، جیانگ و همکاران [۹] مطالعه‌ای در ارتباط با شیمی تشکیل آروماتیک در شعله‌های متان انجام دادند. مدل پیشنهادی آن‌ها پیش‌بینی مناسبی از آروماتیک‌ها ارائه می‌کند و تا حد قابل توجهی تشکیل بنزن را در شعله‌های جریان مخالف نفوذی متان نشان می‌دهد.

ونگ و همکاران [۱۰] اثرات افزودن پرنول و ایزوپرنول بر هیدروکربن آروماتیک چند حلقه‌ای و تشکیل دوده در شعله‌های اتیلن/متان جریان مخالف را به صورت تجربی و عددی مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها توزیع کسر حجمی دوده و هیدروکربن آروماتیک چند حلقه‌ای در شعله‌های احتراق را به ترتیب از طریق تابش ناشی از لیزر و فلورسانس ناشی از لیزر اندازه‌گیری کردند. چنگ و همکاران [۱۱] ویژگی‌های انتشار NO و CO شعله‌های گاز هیدروژن غنی شده/هوا را به صورت آرام و مغشوش به روش تجربی و عددی مورد مطالعه قرار دادند.

نتایج آن‌ها نشان داد که برای شعله‌های آرام و مغشوش، ماکزیمم کسر مولی NO با افزایش نسبت هم ارزی از ۰/۶ به ۱ افزایش و با افزایش نرخ کرنش، کاهش یافت. در سرعت جریان یکسان، شعله‌های مغشوش در مقایسه با شعله‌های آرام، ماکزیمم کسر مولی NO کمتر و منطقه‌ی تشکیل NO گسترده‌تری را نشان دادند.

یکی از انواع شعله‌های غیر پیش آمیخته، شعله‌ی جریان مخالف نفوذی می‌باشد. در این مدل شعله، جریان‌های سوخت و اکسید کننده از طریق دو نازل به صورت عمودی و در امتداد یک محور به همدیگر برخورد کرده و ناحیه‌ی شعله در حد فاصل بین دو نازل تشکیل می‌شود.

مطالعات مختلفی به صورت عددی و آزمایشگاهی توسط محققان برای کنترل آلاینده‌های زیست محیطی [۱] در فرایندهای احتراقی از جمله مدل شعله‌های جریان مخالف نفوذی انجام شده است.

ساه و آتريا [۲] تأثیر بخار آب بر جریان‌های مخالف نفوذی را مورد مطالعه قرار دادند و دریافتند که به جز دو اثر فیزیکی بخار آب یعنی خنک‌کاری جامد مشتعل و خاموش‌کنندگی به وسیله‌ی رقیق‌سازی اکسیدکننده یا سوخت، اثر سوئی نیز وجود دارد که هنوز ناشناخته است و آن افزایش واکنش‌های شیمیایی در داخل ناحیه‌ی شعله با بخار آب است. آن‌ها ساختار جزئی شعله‌های جریان مخالف با بخار آب را اندازه‌گیری کردند تا دریابند که چه اتفاقی در داخل شعله رخ می‌دهد و چگونه واکنش‌ها افزایش می‌یابند.

ریبرت [۳] تأثیر محدوده‌ی فشار ۱Mpa تا ۲۵Mpa و دمای ورودی اکسیژن ۱۰۰K تا ۳۰۰K را روی شعله‌های رقیق شده و رقیق نشده‌ی هیدروژن-هوا مطالعه کرد. وی دریافت که افزایش فشار و دمای ورودی هر دو منجر به افزایش دمای ماکزیمم و نرخ حرارت آزاد شده می‌شوند. مطالعه‌ی ساختار شعله و انتشار NO در شعله‌های جریان مخالف هیدروژن/هوا رقیق شده با CO_2 توسط چنگ و همکاران [۴] انجام شده است. در این تحقیق تغییرات ماکزیمم دما در مقابل دمای اکسیدکننده بررسی گردید. ماکزیمم دما با افزایش دمای اکسیدکننده، افزایش یافته و حضور رقیق‌ساز CO_2 منجر به کاهش ماکزیمم دما می‌شود.

ژنگ و همکاران [۵] تشکیل دوده‌ی n-هپتان را به صورت تجربی و عددی در مقادیر نرخ کرنش کم شعله‌ی جریان مخالف مورد مطالعه قرار دادند. نتایج بیانگر آن است که دمای شعله‌ی بالاتر در منطقه‌ی دوده منجر به ذرات و سنگدانه‌های دوده می‌شود که با اندازه‌های بزرگ‌تر و بی‌هیدروژنه‌تر تولید می‌شوند. بنابراین دمای بالا در شعله یکی از عوامل تشکیل و انتشار دوده می‌باشد.

یو و همکاران [۶] در تحقیقی به بررسی انتشار NO_x در احتراق پرداختند. مطالعه‌ی آن‌ها بر ساختار سلسله مراتبی مینیفولدهای واکنش-نفوذ تمرکز داشت. محاسبات نمونه برای

درخشندگی شعله و توزیع غلظت دوده دارد. هر دو رقیق کننده‌ی N_2 و CO_2 تشکیل دوده و اکسیداسیون را محدود می‌کنند اما اثر CO_2 به دلیل خواص حرارتی و شیمیایی آن بیشتر است.

تحقیقی با هدف بررسی اثرات افزودن آمونیاک بر شعله‌های جریان مخالف نفوذی اتیلن با رقیق کننده‌های مختلف در سمت سوخت یا اکسیدکننده، با استفاده از تحلیل‌های سینتیکی توسط شو و همکاران [۱۶] انجام شد. هدف اصلی در این پژوهش، بررسی اثرات شیمیایی NH_3 و CO_2 در احتراق C_2H_4 بود. نتایج آن‌ها نشان داد که افزودن NH_3 باعث کاهش کسر مولی و نرخ تولید پیش‌سازهای کلیدی دوده مانند استیلن، پروپینیل و بنزن می‌شود. همچنین با افزودن CO_2 در سمت اکسیدکننده، کسر مولی رادیکال‌های H ، O ، OH ، استیلن، پروپینیل و بنزن کاهش یافت.

ونگ و همکاران [۱۷] اثر افزودن هیدروژن در سوخت موتور در حالت دوگانه سوز مبتنی بر گاز طبیعی و گازوئیل را که پتانسیل زیادی برای بهبود راندمان موتور و کاهش انتشار گازهای گلخانه‌ای دارد، مطالعه کردند. شبیه‌سازی‌های عددی برای بررسی تشکیل دوده‌ی موتورهای دوگانه سوز گاز طبیعی-دیزلی انجام شد و اثرات افزودن H_2 به عنوان رقیق کننده بر تشکیل دوده در شعله‌های نفوذی آرام مطالعه گردید. نتایج نشان می‌دهد که اثرات رقیق‌کنندگی و حرارتی H_2 تشکیل دوده را مهار می‌کند، در حالی که اثرات شیمیایی H_2 باعث تشکیل دوده، تحت فشارهای مختلف می‌شود.

مطالعه‌ی تحقیقات پیشین نشان می‌دهد که بررسی انتشار آلاینده‌ها و کاهش آن‌ها در فرایندهای احتراقی، اهمیت ویژه‌ای دارد. اما تا کنون اثر گاز آرگون^۲ به عنوان یک رقیق کننده بر شعله‌های جریان مخالف نفوذی متان بررسی نشده است. در این پژوهش، شبیه‌سازی احتراق متان/هوا با استفاده از مدل شعله‌ی جریان مخالف نفوذی با رقیق کننده‌ی گاز آرگون به عنوان یک عنصر شیمیایی بی اثر، فراوان‌ترین گاز موجود در پوسته زمین و پر استفاده‌ترین گاز در صنعت انجام شده است. در همین راستا ابتدا اثر نرخ کرنش و رقیق کننده بر دمای احتراق و میزان تولید گونه‌های H و OH بررسی شد و در ادامه اثر افزودن رقیق کننده بر میزان انتشار گونه‌های آلاینده مانند NO ، NO_2 ، CO و C_2H_2 مطالعه گردید. در این پژوهش از مکانیزم [۱۸] GRI3.0 به عنوان سینتیک شیمیایی استفاده شده است که این مکانیزم شامل ۳۲۵ واکنش برگشت‌پذیر و ۵۳ گونه است.

سورش و همکاران [۱۲] به مطالعه‌ی تأثیر تغلیظ آمونیاک و احتراق افزایش یافته به کمک اکسیژن بر میزان انتشار NO_x در شعله‌های نفوذی اتیلن پرداختند. آن‌ها شبیه‌سازی خود را با استفاده از نرم افزار کمکین^۱ انجام دادند. نتایج آن‌ها نشان داد که تغلیظ آمونیاک در شعله‌های اتیلن، منجر به افزایش قابل توجه NO_x می‌شود، در حالی که اکسیژن‌سازی، تأثیر ناچیزی بر انتشار NO_x دارد.

تأثیر هیدروژن بر تولید دوده و ساختار شعله‌های جریان مخالف آرام متان/هوا توسط خارو و همکاران [۱۳] مورد مطالعه قرار گرفت. محدوده‌ی تشکیل دوده با استفاده از روش پراکندگی نور لیزر برای مخلوط CH_4/H_2 با غلظت‌های متفاوت H_2 از ۰ تا ۲۰ درصد حجمی در مخلوط سوخت برای نرخ‌های کرنش مختلف بررسی گردید. در این پژوهش، دمای شعله با استفاده از یک ترموکوپل سیم نازک نوع S اندازه‌گیری شد و منحنی گونه‌ها با استفاده از تکنیک کروماتوگرافی گازی، ترسیم گردید. نتایج آن‌ها نشان داد که با افزایش غلظت H_2 ، مقادیر هیدروکربن‌های بالاتر مانند بنزن و نفتالین که از پیش‌سازهای مهم دوده در نظر گرفته می‌شوند، به طور قابل توجهی کاهش یافت.

شبیه‌سازی‌های عددی برای بررسی اثرات افزودن CO_2 به سمت سوخت در شعله‌های نفوذی آرام اتیلن/هوا در فشارهای ۱، ۵ و ۹ اتمسفر در محدوده کسر مولی ۰ تا ۰٫۲ بر روی تشکیل دوده و ساختار شعله توسط ونگ و همکاران [۱۴] انجام شد. هدف از این تحقیق، ایجاد پایه‌ای برای تحقیقات آینده در مورد ویژگی‌های تولید دوده در شرایط عملیاتی احتراق واقعی است. نتایج نشان داد که فشار بالا، ساختار شعله را تغییر داده و بار دوده را به طور قابل توجهی افزایش می‌دهد که باعث کاهش ماکزیمم کسر مولی رادیکال‌های H ، O و OH و همچنین پیش‌سازهای دوده شد. افزودن CO_2 در فشارهای ۱، ۵ و ۹ اتمسفر به طور قابل توجهی، کسر حجمی دوده را کاهش داد. این در حالی است که افزودن CO_2 در فشارهای ۵ و ۹ اتمسفر منجر به افزایش ماکزیمم کسر مولی OH در شعله شد.

ژنگ و همکاران [۱۵] تأثیر رقیق کننده‌های N_2 و CO_2 به اکسیدکننده را برای مطالعه‌ی رفتار دوده در شعله‌های نفوذی آرام n-هپتان تحت دماهای پیش گرمایش مختلف بررسی کردند. شبیه‌سازی‌های عددی آن‌ها با بررسی اثر این افزودنی‌ها بر روی گونه‌های کلیدی برای تشکیل هیدروکربن‌های آروماتیک چند حلقه‌ای در دماهای مختلف پیش گرم انجام شد. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که افزودن N_2 و CO_2 تأثیر قابل توجهی بر

^۲ Argon^۱ CHEMKIN-Pro

۲- هندسه و معادلات حاکم

که در آن فشار است. معادله‌ی مومنتم شعاعی به صورت زیر است:

$$H - 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{FG}{\rho} \right) + \frac{3G^2}{\rho} + \frac{d}{dx} \left[\mu \frac{d}{dx} \left(\frac{G}{\rho} \right) \right] = 0 \quad (5)$$

که در آن μ لزجت دینامیکی است. معادلات انرژی و بقای گونه‌ها نیز به شکل زیر می‌باشند:

$$\rho u \frac{dT}{dx} - \frac{1}{C_p} \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) + \frac{\rho}{C_p} \sum_k C_{pk} Y_k V_k \frac{dT}{dx} + \frac{1}{C_p} \sum_k h_k \dot{\omega}_k = 0 \quad (6)$$

$$\rho u \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} (\rho Y_k V_k) - \dot{\omega}_k W_k = 0 \quad (7)$$

که در آن T ، C_p ، λ ، C_{pk} ، Y_k ، V_k ، h_k ، $\dot{\omega}_k$ و W_k به ترتیب دما، ظرفیت گرمایی ویژه فشار ثابت، هدایت حرارتی، ظرفیت گرمایی ویژه فشار ثابت گونه‌ی k ام، کسر جرمی گونه‌ی k ام، سرعت نفوذی گونه‌ی k ام، آنتالپی گونه‌ی k ام، نرخ تولید یا مصرف گونه‌ی k ام و وزن مولکولی گونه‌ی k ام می‌باشد. سرعت‌های نفوذی به شکل زیر هستند:

$$V_k = \frac{1}{X_k \bar{W}} \sum_{j=1}^K W_j D_{kj} \frac{dX_j}{dx} - \frac{D_k^T}{\rho Y_k} \frac{1}{T} \frac{dT}{dx} \quad (8)$$

یا به شکل فرمولاسیون میانگین برای ترکیب داریم:

$$V_k = \frac{1}{X_k} D_{km} \frac{dX_k}{dx} - \frac{D_k^T}{\rho Y_k} \frac{1}{T} \frac{dT}{dx} \quad (9)$$

که

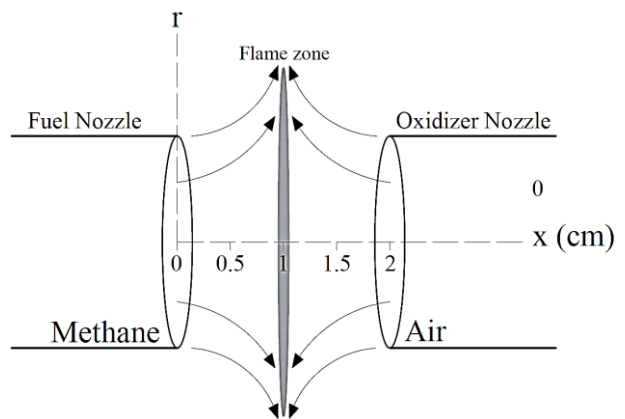
$$D_{km} = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^K X_j / D_{jk}} \quad (10)$$

و همچنین D_{kj} ، D_{km} ، D_{jk} و X و \bar{W} به ترتیب ضرایب چند جزئی، نفوذ حرارتی، میانگین ترکیب، دوتایی، کسر مولی گونه‌ها و وزن مولکولی متوسط می‌باشند.

با توجه به اینکه F و G فقط توابعی از x هستند، T ، ρ ، Y_k و u نیز توابعی فقط از x می‌باشند. شرایط مرزی برای جریان‌های سوخت (F) و اکسیدکننده (O) در نازل‌ها به صورت زیر هستند:

$$\begin{cases} x = 0: F = \frac{\rho_F u_F}{2}, G = 0, T = T_F, \rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_F \\ x = L: F = \frac{\rho_O u_O}{2}, G = 0, T = T_O, \rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_O \end{cases} \quad (11)$$

شکل (۱) شماتیک هندسه متقارن محور شعاعی جریان مخالف را نشان می‌دهد. دما و فشار محیط به ترتیب $298K$ و 1 atm در نظر گرفته شد. ضریب نرخ واکنش گازی برابر ۱ و مقدار گرادیان شعاعی در سرعت‌های ورودی برابر ۰ اعمال گردید. سرعت و دمای ورودی برای جریان‌های سوخت و اکسیدکننده به ترتیب برابر 100 cm/s و $300K$ در نظر گرفته شد. فاصله‌ی بین دهانه‌ی نازل‌های سوخت و اکسیدکننده 2 cm می‌باشد. کسر مولی گونه‌ها در دهانه خروجی نازل‌ها نیز معلوم است. جریان، پایدار، آرام و یک بعدی در نظر گرفته شده است. بنابراین خواص سیال و غلظت گونه‌ها، تابع فاصله‌ی محوری هستند.



شکل ۱ شماتیک مدل شعاعی جریان مخالف نفوذی پژوهش حاضر

معادلات حاکم برای شعاعی جریان مخالف نفوذی که شماتیک آن در شکل (۱) نشان داده شده است، به صورت زیر است [۱۹]: معادله‌ی بقای جرم:

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

که در آن u و v مولفه‌های سرعت شعاعی و محوری بوده و ρ چگالی است. با در نظر گرفتن فرضیه‌ی ون کارمان [۲۰] که در آن $\frac{v}{r}$ و سایر متغیرها بایستی فقط تابعی از x باشند، داریم:

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

با جایگذاری F و G در معادله‌ی پیوستگی و ساده‌سازی داریم:

$$G(x) = \frac{dF(x)}{dx} \quad (3)$$

معادله‌ی مومنتم شعاعی با مقدار ویژه‌ی زیر ارضاء می‌شود:

$$H = \frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial r} = \text{const} \quad (4)$$

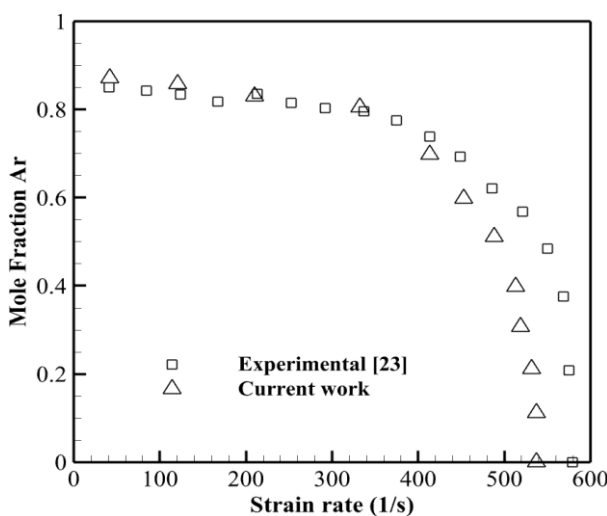
تصحیح می‌کند. معیار همگرایی به منظور رسیدن مقادیر باقی‌مانده‌ها به کمتر از 10^{-5} می‌باشد.

۳- نتایج

۳-۱- بررسی اعتبار نتایج

برای بررسی اعتبار نتایج به مقایسه‌ی منحنی کسر مولی رقیق‌کننده بر حسب نرخ کرنش در نزدیکی نقطه‌ی خاموشی با نتایج آزمایشگاهی مرجع [۲۳] و همچنین منحنی ماکزیمم کسر مولی گونه‌های H_2O و OH بر حسب نرخ کرنش با نتایج عددی مرجع [۲۴] پرداخته شد. برای رسیدن به نقطه‌ی خاموشی، سرعت‌های خروجی را به تدریج افزایش داده تا شعله خاموش شود. با استفاده از این سرعت می‌توان نرخ کرنش خاموشی در یک کسر مولی خاص رقیق‌کننده را محاسبه نمود. ماکزیمم دما نیز در این نقطه، ماکزیمم دما در نزدیکی نقطه‌ی خاموشی است.

شکل (۲) منحنی کسر مولی رقیق‌کننده را بر حسب نرخ کرنش خاموشی نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که افزودن رقیق‌کننده به سوخت باعث تغییر خواص گرمایی سوخت شده و بنابراین در احتراق آن موثر است و در نتیجه باعث کاهش نرخ کرنش (که معیاری برای سنجش حد خاموشی است) می‌شود. در ابتدای افزایش رقیق‌کننده که کسر مولی آن کم است، اختلاف بین مقادیر عددی و آزمایشگاهی زیاد است. اما با افزایش کسر مولی رقیق‌کننده، اختلاف بین مقادیر عددی و آزمایشگاهی کم شده و با دقت خوبی بر هم منطبق می‌شوند.



شکل ۲ منحنی کسر مولی رقیق‌کننده بر حسب نرخ کرنش در نقطه‌ی خاموشی

نرخ کرنش توسط شادری و ویلیامز [۲۱] به صورت زیر تعریف شده است.

$$a = \frac{2V_{ox}}{L} \left(1 + \frac{V_F \sqrt{\rho_F}}{V_{ox} \sqrt{\rho_{ox}}} \right) \quad (12)$$

که در آن L فاصله‌ی بین دهانه‌ی دو نازل و V_F و V_{ox} سرعت‌های سوخت و اکسیدکننده هستند. ρ_F و ρ_{ox} نیز چگالی سوخت و اکسیدکننده می‌باشند.

حل معادلات با استفاده از $OPPDIF^1$ [۲۲] که یک کد عددی به زبان فرترن است، انجام پذیرفت. انفصال معادلات دیفرانسیلی به روش‌های شناخته شده صورت می‌گیرد. جمله‌ی نفوذ به کمک روش تفاضل مرکزی با خطای مرتبه‌ی دو در فاصله‌ی مش‌بندی منفصل می‌گردد. برای ایجاد همگرایی بیشتر در انفصال جمله جابجایی از روش بالا دست^۲ که قادر به تشخیص جهت جریان است، استفاده می‌شود. به عنوان مثال اگر $u_i > 0$ باشد، ترم جابجایی در معادله‌ی انرژی به صورت زیر منفصل می‌شود:

$$\rho u \frac{dT}{dx} \approx \rho_i u_j \frac{T_j - T_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} \quad (13)$$

خطای برشی این تقریب در فاصله‌ی مش‌بندی از مرتبه‌ی یک می‌باشد که باعث نفوذ مصنوعی^۳ می‌شود، اما از ایجاد نوسانات در طول حل روی یک شبکه‌ی درشت، جلوگیری می‌کند.

معادلات منفصل شده به کمک حلگر دو نقطه‌ای^۴ حل می‌شود. حلگر دو نقطه‌ای از روش نیوتن برای حل معادلات پایدار استفاده می‌کند و هنگامی که تکرار نیوتن، همگرا نمی‌شود از انتگرال‌گیری زمانی استفاده می‌کند. بعد از انتگرال‌گیری زمانی، حل را به حالت پایدار نمو می‌دهد و برای همگرایی سریع به روش‌های نیوتن بر می‌گردد. در محاسبه‌ی اولین حل یک شعله‌ی جدید، حلگر ممکن است قبل از همگرایی، در بین انتگرال‌گیری زمانی و روش نیوتن چند بار به عقب و جلو پرش کند. با این وجود یک شعله که برای اولین بار حل می‌شود، حل‌های بعدی می‌توانند به طور موثرتر با استفاده از تغییر شرایط مرزی و حل قبلی انجام شوند. تجربیات نشان می‌دهند که به منظور سرعت همگرایی بهتر است که حل با یک مش‌بندی درشت آغاز شود. پس از همگرایی اولین حل، حلگر، حل را بوسیله‌ی اضافه‌کردن نقاط جدید در مناطق دارای گرادیان شدید یا منحنی‌کردن حل،

³ Artificial diffusion

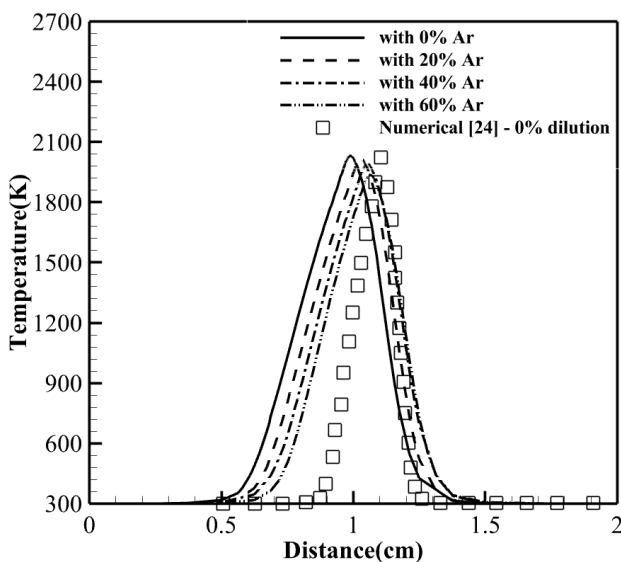
⁴ Twopnt (two-point boundary value solver)

¹ Opposed-Flow Diffusion Flames

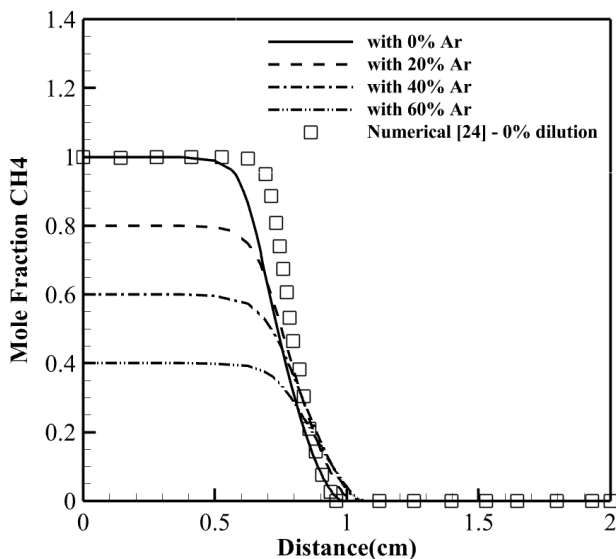
² Upwind

با یکدیگر، مطابقت خوبی دارند. اما موقعیت حداکثر دما در مرجع [۲۴] به میزان کمی با مقدار متناظر آن در پژوهش حاضر متفاوت است که می‌تواند به دلیل اختلاف در نرخ کرنش اولیه باشد.

همانطور که در شکل (۵) مشاهده می‌شود با افزایش درصد رقیق کننده، منحنی‌های کسر مولی گونه‌ی CH_4 به سمت اکسید کننده متمایل می‌شوند. با افزایش درصد رقیق کننده و نیز کاهش دما، واکنش‌های شکست بین زنجیره اتم‌های سوخت که منجر به تولید رادیکال H می‌شود کاهش یافته و در نتیجه از مقدار این رادیکال کاسته می‌شود. نتیجه آن است که سوخت، کمتر تحت تأثیر رادیکال H قرار گرفته و می‌تواند در سمت اکسید کننده، نفوذ بیشتری داشته باشد.

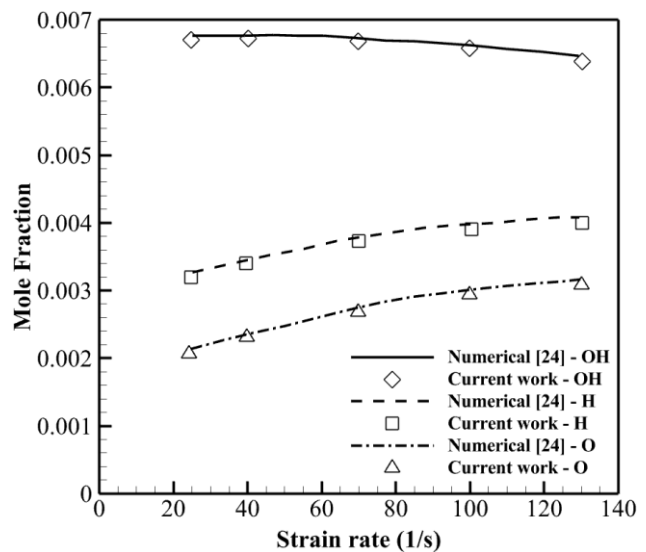


شکل ۴ منحنی دما بر حسب فاصله در درصدهای مختلف رقیق سازی



شکل ۵ منحنی کسر مولی CH_4 بر حسب فاصله در درصدهای مختلف رقیق سازی

شکل (۳) منحنی ماکزیمم کسر مولی گونه‌های H ، O و OH بر حسب نرخ کرنش را نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود انطباق خوبی بین نتایج دو حل عددی وجود دارد. افزایش نرخ کرنش باعث افزایش ماکزیمم کسر مولی گونه‌های O و H و همچنین کاهش ماکزیمم کسر مولی گونه‌ی OH می‌شود. به عبارتی افزایش نرخ کرنش به عنوان یک پارامتر کلیدی باعث مصرف بیشتر گونه‌ی OH برای تشکیل رادیکال‌های آزاد O و H می‌شود.



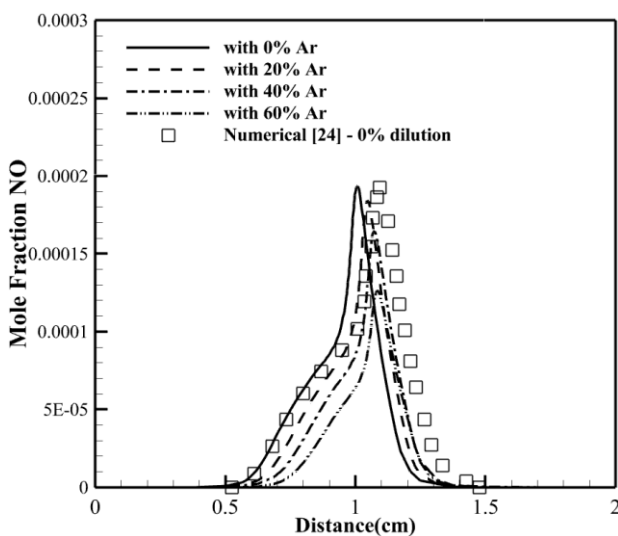
شکل ۳ منحنی ماکزیمم کسر مولی گونه‌های H ، O و OH بر حسب نرخ کرنش

۳-۲- احتراق متان و اثر رقیق کننده بر آن

مدل سازی برای چهار شعله با درصد رقیق سازی ۰، ۲۰، ۴۰ و ۶۰ انجام شده است. شکل (۴) منحنی‌های دما بر حسب فاصله‌ی دو نازل را در درصدهای مختلف رقیق سازی با آرگون نشان می‌دهد. افزایش درصد رقیق کننده‌ی آرگون باعث کاهش غلظت‌های گونه‌های حاضر در واکنش می‌شود و بنابراین شدت واکنش‌ها کاهش می‌یابد. با کاهش شدت واکنش‌ها، شدت واکنش کلی کاهش یافته و در نتیجه ماکزیمم دما کاهش می‌یابد. با دقت در شکل (۴) در می‌یابیم که با افزایش درصد رقیق کننده از ۰٪ تا ۶۰٪ دما حدود ۹۴K کاهش یافته و موقعیت ماکزیمم دما به سمت اکسید کننده حرکت می‌کند و این یعنی سوخت بیشتر به سمت اکسید کننده نفوذ می‌کند. شکل (۵) که کسر مولی سوخت متان بر حسب فاصله را نشان می‌دهد، موید این مطلب است.

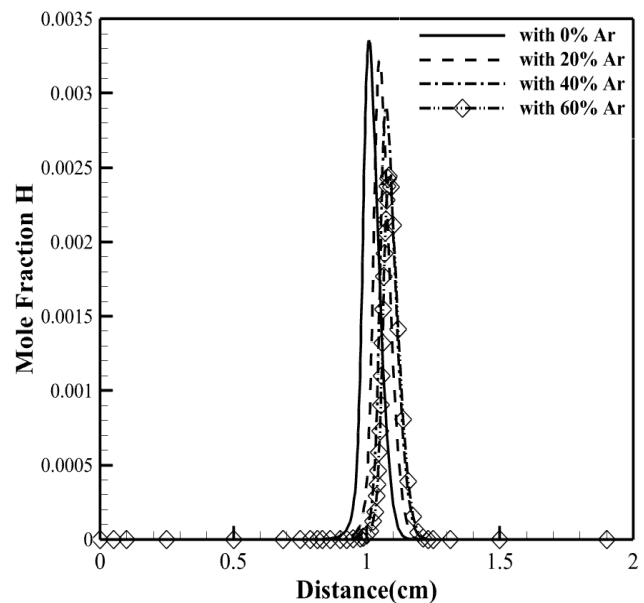
نتایج منحنی دما در حالت بدون رقیق سازی در شکل (۴) با نتایج عددی مرجع [۲۴] نیز مقایسه شده است. همانطور که مشاهده می‌شود مقدار حداکثر دما در این مرجع و پژوهش حاضر

افزایش رقیق کننده علاوه بر اینکه از طریق رقیق سازی، کاهش NO_x را باعث می شود، با کاهش دما باعث کاهش تولید NO حرارتی نیز می شود. زیرا سرعت تشکیل NO حرارتی کم بوده و در نواحی پس شعله تشکیل می شود. با کاهش دما انرژی لازم برای شکست پیوند سه گانه N_2 کاهش یافته و NO_x کمتری تولید می شود. به مکانیزم تولید NO از طریق مکانیزم حرارتی که در زیر آمده است، توجه کنید.

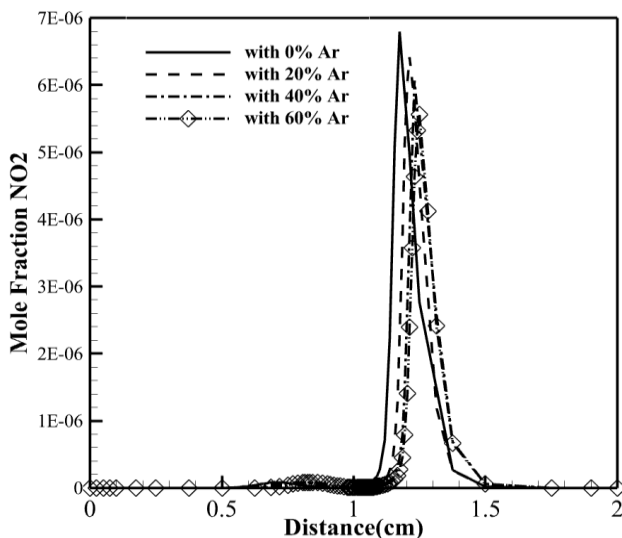


شکل ۷ منحنی کسر مولی NO بر حسب فاصله در درصد های مختلف رقیق سازی

نتایج منحنی کسر مولی گونه CH_4 در حالت بدون رقیق سازی در شکل (۵) با نتایج عددی مرجع [۲۴] نیز مقایسه شده است و همانطور که پیداست با نتایج پژوهش حاضر مطابقت خوبی دارد. اختلاف کم بین نتایج پژوهش مذکور و پژوهش حاضر در ابتدای ناحیه شعله که در آن مصرف گونه CH_4 آغاز می شود به دلیل تفاوت در نرخ واکنش های تشکیل دهنده رادیکال های آزاد H و OH است که رفته رفته با شدت گرفتن واکنش ها، این اختلاف به حداقل رسیده و منحنی ها بر هم منطبق می شوند.



شکل ۶ منحنی کسر مولی H بر حسب فاصله در درصد های مختلف رقیق سازی



شکل ۸ منحنی کسر مولی NO_2 بر حسب فاصله در درصد های مختلف رقیق سازی

نتایج منحنی کسر مولی گونه NO در حالت بدون رقیق سازی در شکل (۷) با نتایج عددی مرجع [۲۴] نیز مقایسه شده

۳-۳- اثر رقیق کننده بر تولید آلاینده ها

در این بخش، اثر رقیق کننده را بر تولید گونه های NO ، NO_2 ، CO و C_2H_2 بررسی می کنیم. NO و NO_2 گاز هایی از خانواده NO_x هستند و CO یک گاز سمی و مضر برای سلامت انسان است. C_2H_2 یک پیش ماده مهم در تولید دوده است. اشکال (۷) و (۸) منحنی کسر مولی گونه های NO و NO_2 را بر حسب فاصله نشان می دهند. همانطور که در این شکل ها مشخص است، ماکزیمم تولید این گونه با افزایش درصد رقیق کننده، کاهش می یابد که مطلوب است. میزان کاهش گونه های NO و NO_2 در شکل های (۷) و (۸) بر اثر افزایش ۶۰٪ رقیق کننده نسبت به حالت بدون رقیق سازی به ترتیب ۳۴/۸٪ و ۱۸/۲٪ می باشد. افزایش درصد رقیق کننده همچنین حرکت ماکزیمم کسر مولی گونه به سمت اکسید کننده را نیز منجر می شود که این به دلیل تغییر خواص حرارتی و نفوذی گونه ها بر اثر دما است.

شکل (۱۰) منحنی کسر مولی گونه‌ی C_2H_2 بر حسب فاصله را نشان می‌دهد. همانطور که پیداست، ماکزیمم کسر مولی این گونه با افزایش درصد رقیق‌کننده، کاهش می‌یابد و علت آن کاهش شدت واکنش $CH+CH_2 \rightarrow H+C_2H_2$ است که در آن C_2H_2 به میزان زیادی تولید می‌شود. افزایش رقیق‌سازی باعث تغییر مکان موقعیت ماکزیمم کسر مولی گونه‌ی C_2H_2 به سمت اکسید کننده شده است که همانطور که پیش‌تر گفته شد به دلیل تغییر خواص حرارتی و نفوذی گونه‌ها بر اثر دما می‌باشد. بر اثر افزایش ۶۰٪ رقیق‌کننده، کسر مولی این گونه ۵۲٪ کاهش می‌یابد.

۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، مدل‌سازی شعله‌های جریان مخالف نفوذی متان انجام شد. بر خلاف تحقیقات قبلی، در این تحقیق از گاز آرگون که یک عنصر شیمیایی بی اثر، فراوان‌ترین گاز موجود در پوسته زمین و پر استفاده‌ترین گاز در صنعت است به عنوان رقیق‌کننده استفاده گردید. شبیه‌سازی‌ها برای چهار شعله با درصدهای رقیق‌سازی ۰، ۲۰، ۴۰ و ۶۰ انجام گردید و نتایج زیر به دست آمد:

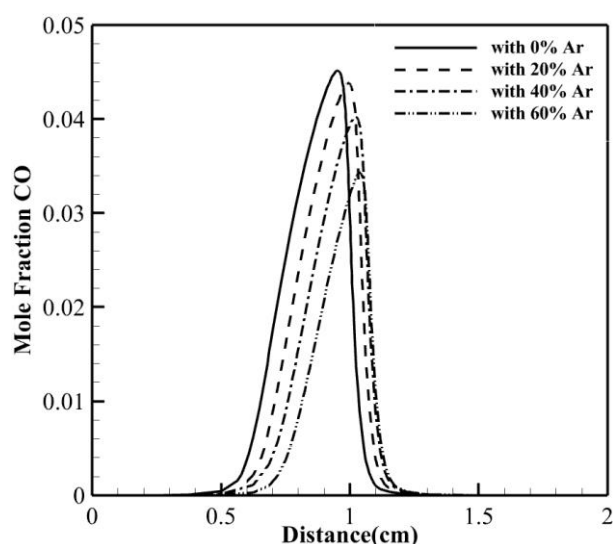
- رقیق‌کننده با کاهش غلظت گونه‌ها باعث کاهش شدت واکنش‌ها و در نتیجه کاهش شدت واکنش کلی می‌شوند که منجر به کاهش ماکزیمم دما نیز می‌گردد.
- اثر رقیق‌سازی و در کنار آن کاهش دما باعث کاهش واکنش‌های شکست بین زنجیره‌های اتم‌های سوخت می‌شود و در نتیجه رادیکال‌های فعال H و OH کاهش می‌یابند. بنابراین سوخت کمتر تحت تأثیر این گونه‌ها قرار گرفته و بیشتر در سمت اکسیدکننده نفوذ می‌کند.
- موقعیت ماکزیمم کسر مولی گونه‌های مختلف به دلیل نفوذ سوخت، به سمت اکسید کننده جابجا می‌شود.
- تولید گونه‌های NO ، NO_2 ، CO و C_2H_2 که همگی جزء آلاینده‌های زیست محیطی هستند با افزایش درصد رقیق‌کننده کاهش می‌یابد.
- افزایش ۶۰٪ رقیق‌کننده به سوخت به طور میانگین میزان تولید آلاینده‌ها را به میزان ۳۲/۲۵٪ کاهش می‌دهد.

۵- فهرست علائم و اختصارات

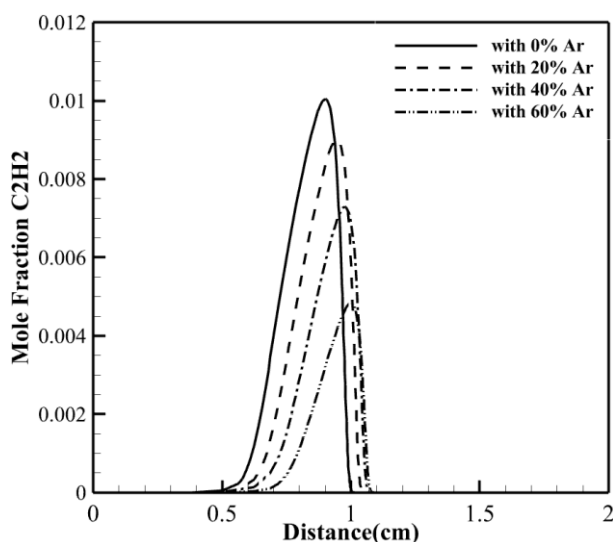
فهرست علائم و اختصارات مورد استفاده در روابط و معادلات پژوهش حاضر به شرح زیر است.

است و همانطور که مشاهده می‌شود مطابقت خوبی میان نتایج دو پژوهش وجود دارد.

شکل (۹) کسر مولی گونه‌ی CO در سطوح مختلف رقیق‌سازی را بر حسب فاصله نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود، تولید این گونه نیز با افزایش درصد رقیق‌کننده، کاهش می‌یابد و دلیل آن کاهش غلظت گونه‌ها از طریق رقیق‌سازی، کاهش دما و متعاقب آن کاهش شدت واکنش‌ها است. در نمودارهای این شکل نیز با افزایش رقیق‌سازی، موقعیت ماکزیمم کسر مولی گونه‌ی CO به سمت اکسید کننده حرکت کرده است که به دلیل تغییر خواص حرارتی و نفوذی گونه‌ها بر اثر دما است. میزان کاهش این گونه بر اثر افزایش ۶۰٪ رقیق‌کننده برابر ۲۴٪ می‌باشد.



شکل ۹ منحنی کسر مولی CO بر حسب فاصله در درصد‌های مختلف رقیق‌سازی



شکل ۱۰ منحنی کسر مولی C_2H_2 بر حسب فاصله در درصد‌های مختلف رقیق‌سازی

علائم انگلیسی

طرفیت گرمایی ویژه ی فشار ثابت ($J/kg.K$)	C_p
ضریب نفوذ چند جزئی (m^2/s)	D_{kj}
ضریب نفوذ حرارتی ($Kg/m.s$)	D_k^T
ضریب نفوذ میانگین ترکیب (m^2/s)	D_{km}
ضریب نفوذ دوتایی (m^2/s)	D_{jk}
آنتالپی (J/Kg)	h
فشار (Pa)	P
دما (K)	T
مؤلفه ی سرعت شعاعی (m/s)	u
مؤلفه ی سرعت محوری (m/s)	v
سرعت نفوذی (m/s)	V
وزن مولکولی ($Kg/Kmol$)	W
وزن مولکولی متوسط ($Kg/Kmol$)	\bar{W}
کسر مولی ($Kmol/Kmol$)	X
کسر جرمی (kg/kg)	Y

علائم یونانی

چگالی (kg/m^3)	ρ
لزجت دینامیکی ($N.s/m^2$)	μ
ضریب انتقال حرارت هدایتی ($W/m.K$)	λ
نرخ تولید یا مصرف گونه ($Kmol/s.m^3$)	$\dot{\omega}$

زیرنویس ها

گونه ی k	k
------------	-----

۶- مراجع

- counterflow diffusion flames: Two-dimensional and oxygen effects," *Combustion and Flame*, vol. 258, p. 112441, 2023, <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2022.112441>.
- [6] C. Yu, P. Shrotriya, X. Li, and U. Maas, "Reduced modeling of the NO_x formation based on the reaction-diffusion manifolds method for counterflow diffusion flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 39, no. 2, pp. 1587-1596, 2023, <https://doi.org/10.1016/j.proci.2022.08.010>.
- [7] J. Zhang, F. Yan, and Y. Wang, "Sensitivity of soot formation to strain rates in counterflow diffusion flames of various C3-C5 alkanes and alcohols," *Fuel*, vol. 333, p. 126321, 2023, <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.126321>.
- [8] W. Feng, L. Qiu, Y. Hua, S. Meng, Y. Zhang, and Y. Qian, "On the soot formation characteristics of an ammonia-ethylene counterflow diffusion flame based on the orthogonal decoupling method," *Fuel*, vol. 352, p. 129012, 2023, <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.129012>.
- [9] P. Jiang, L. Xu, Q. Wang, Z. Wang, S. H. Chung, and Y. Wang, "Experimental and kinetic study on aromatic formation in counterflow diffusion flames of methane and methane/ethylene mixtures," *Fuel*, vol. 354, p. 129304, 2023, <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.129304>.
- [10] B. Wang, Y. Xu, Z. Jiang, Y. Liu, K. Zhang, X. Cheng, and J. Yao, "Effects of pre-nol and isoprenol addition on soot and PAH formation in ethylene/methane counterflow diffusion flames," *Fuel*, vol. 331, p. 125783, 2023, <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.125783>.
- [11] L. Cheng, Y. Chen, Y. Pei, G. Sun, J. Zou, S. Peng, and Y. Zhang, "NO and CO Emission Characteristics of Laminar and Turbulent Counterflow Premixed Hydrogen-Rich Syngas/Air Flames," *Processes*, vol. 12, no. 3, p. 475, 2024, <https://doi.org/10.3390/pr12030475>.
- [12] R. Suresh, K. C. Kalvakala, and S. K. Aggarwal, "A numerical study of NO_x and soot emissions in ethylene-ammonia diffusion flames with oxygen enrichment," *Fuel*, vol. 362, p. 130834, 2024, <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.130834>.
- [13] R. Khare, P. Vlavakis, T. Von Langenthal, A. Loukou, M. Khosravi, U. Kramer, and D. Trimis, "Experimental investigation of the effect of hydrogen addition on the sooting limit and structure of methane/air laminar counterflow diffusion flames," *Fuel*, vol. 324, p. 124506, 2022, doi: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.124506>.
- [1] M. Yadegari and M. Ghassemi, "Investigation of the Effects of Temperature, Mass Flow Rate of the Injected Fuel, Pore Diameter, Porosity and Ambient Pressure on the Amount of Pollutants in the Combustion Chamber," *Iranian Journal of Mechanical Engineering Transactions of the ISME*, vol. 23, no. 1, pp. 122-146, 2022, doi: [10.30506/JMEE.2022.547922.1282](https://doi.org/10.30506/JMEE.2022.547922.1282).
- [2] J. Suh and A. Atreya, "The effect of water vapor on counterflow diffusion flames," in *International Conference on Fire Research and Engineering*, 1995, vol. 103: Citeseer, doi: [9449561370e41b3302d1a0dc8bb6c7c07717c49](https://doi.org/10.1109/ICFRE.1995.9449561370e41b3302d1a0dc8bb6c7c07717c49).
- [3] G. Ribert, N. Zong, V. Yang, L. Pons, N. Darabiha, and S. Candel, "Counterflow diffusion flames of general fluids: Oxygen/hydrogen mixtures," *Combustion and Flame*, vol. 154, no. 3, pp. 319-330, 2008, <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2008.04.023>.
- [4] J. Park, K. T. Kim, J. S. Park, J. S. Kim, S. Kim, and T. K. Kim, "A study on H₂- air counterflow flames in highly preheated air diluted with CO₂," *Energy & fuels*, vol. 19, no. 6, pp. 2254-2260, 2005, <https://doi.org/10.1021/ef050152l>.
- [5] D. Zheng, A. Nobili, A. Cuoci, M. Pelucchi, X. Hui, and T. Faravelli, "Soot formation from n-heptane

- Series. McGraw Hill*, p. 51, 2000, doi: [OCLC: 660161844](https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2024.109422).
- [20] T. V. Kármán, "Über laminare und turbulente Reibung," *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, vol. 1, no. 4, pp. 233-252, 1921, <https://doi.org/10.1002/zamm.19210010401>.
- [21] K. Seshadri and F. Williams, "Laminar flow between parallel plates with injection of a reactant at high Reynolds number," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 21, no. 2, pp. 251-253, 1978, [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(78\)90230-2](https://doi.org/10.1016/0017-9310(78)90230-2).
- [22] A. E. Lutz, R. J. Kee, J. F. Grcar, and F. M. Rupley, "OPPDIF: A Fortran program for computing opposed-flow diffusion flames," Sandia National Lab. (SNL-CA), Livermore, CA (United States), 1997, <https://doi.org/10.2172/568983>.
- [23] R.-H. Chen, M. Chaos, and A. Kothawala, "Lewis number effects in laminar diffusion flames near and away from extinction," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 31, no. 1, pp. 1231-1237, 2007, <https://doi.org/10.1016/j.proci.2006.07.101>.
- [24] F. Ren, L. Xiang, H. Chu, and W. Han, "Effects of strain rate and CO₂ on NO formation in CH₄/N₂/O₂ counter-flow diffusion flames," *Thermal Science*, vol. 22, no. Suppl. 2, pp. 769-776, 2018, doi: <https://doi.org/10.2298/TSCI170922062R>.
- [14] D. Wang, J. Yao, R. Hong, W. Dong, B. Qiu, and H. Chu, "Effects of pressure and CO₂ dilution on soot formation in coflow ethylene/air laminar diffusion flames by numerical simulation," *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 107, p. 109422, 2024, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2024.109422>.
- [15] Z. Zhang, C. Zhang, Y. Wu, J. Zhang, X. He, and L. Zhou, "Effects of N₂ and CO₂ addition to oxidizer on soot formation in n-heptane laminar diffusion flame at preheating temperatures," *Fuel*, vol. 374, p. 132480, 2024, doi: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.132480>.
- [16] Z. Shu *et al.*, "Comprehensive kinetic study on ammonia/ethylene counter-flow diffusion flames: influences of diluents," *International Journal of Coal Science & Technology*, vol. 11, no. 1, p. 15, 2024, doi: [10.1007/s40789-024-00663-3](https://doi.org/10.1007/s40789-024-00663-3).
- [17] D. Wang, J. Yao, W. Dong, Z. Rui, W. Pan, and H. Chu, "Numerical investigation of soot formation in methane/n-heptane laminar diffusion flame doped with hydrogen at elevated pressure," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 79, pp. 1237-1249, 2024, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.07.082>.
- [18] <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/releases.html>.
- [19] R. Stephen, "Turns. An introduction to combustion: concepts and applications," *Mechanical Engineering*