

بررسی سینتیکی سرعت شعله‌ی مخلوط پیش‌آمیخته‌ی آمونیاک/متان در شرایط مختلف پیش‌گرمایش

محمدرضا کهنسال^{۱*}، مهرداد کیانی^۲، احسان هوشفر^۳، مهدی اشجعی^۴
۱- کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران، kohansal.mr@ut.ac.ir
۲- دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران، mehrdad.kiani@ut.ac.ir
۳- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران، houshfar@ut.ac.ir
۴- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران، ashjaee@ut.ac.ir
* نویسنده مخاطب

چکیده

یکی از راه‌های بهبود ویژگی‌های احتراقی یک سوخت، استفاده از افزونه^۴ است. معمولاً افزونه‌ها به گونه‌ای انتخاب می‌شوند که یک یا چند ویژگی احتراقی سوخت پایه را بهبود بخشند. هیدروژن، سوخت دیزل و متان از جمله افزونه‌هایی هستند که تا به حال به منظور هم‌سوزی با آمونیاک مورد بررسی قرار گرفته‌اند.

سرعت شعله یکی از مهم‌ترین فاکتورهای یک سوخت به منظور بررسی رفتار شعله‌ی آن است. سرعت شعله مشخصه‌ای مهم در بررسی پدیده‌هایی مانند فلش‌بک^۵، انفجار^۶ و پایدارسازی شعله^۷ محسوب می‌شود. همچنین در اعتبارسنجی و بهبود مکانیزم‌های شیمیایی نیز مورد استفاده قرار می‌گیرد [۶].

بررسی سرعت شعله‌ی آمونیاک خالص در پژوهشی توسط هایاکاوا و همکاران^۸ انجام شد. نتایج حاصل نشان دهنده‌ی سرعت شعله‌ی پایین آمونیاک نسبت به هیدروکربن‌های مصرفی در صنعت مانند متان است. در پژوهش دیگری هان و همکاران^۹ [۷] اثر پیش‌گرم کردن بر سرعت شعله‌ی آمونیاک خالص را بررسی کردند. اگرچه با پیش‌گرم کردن سرعت شعله‌ی آمونیاک خالص تا حد زیادی افزایش می‌یابد ولی همچنان به سرعت شعله‌ی سوخت مصرفی در صنعت مانند متان نمی‌رسد.

بررسی احتراق مخلوط سوختی هیدروژن/آمونیاک به دلیل بی‌کربن بودن آن، توسط پژوهشگران بسیاری مورد بررسی قرار گرفته است. لی و همکاران^{۱۰} [۸] به بررسی سرعت شعله‌ی هیدروژن/آمونیاک در دما و فشار اتاق و ایچی‌کاوا و همکاران^{۱۱} [۹] به بررسی سرعت شعله‌ی همین مخلوط در فشارهای بالا تا ۵ اتمسفر پرداخته‌اند. بررسی‌های مشابهی توسط کومار و میر^{۱۲} [۱۰] و لی و همکاران^{۱۳} [۱۱] نیز انجام شده است. نتایج این تحقیق‌ها نشان می‌دهد که با افزایش مقدار هیدروژن در مخلوط سوختی، سرعت شعله به میزان زیادی و به شکل نمایی افزایش می‌یابد. اگرچه ویژگی‌های احتراقی مطلوب هیدروژن خصوصیات احتراقی ضعیف آمونیاک را پوشش می‌دهد ولی مشکلات مربوط به انتقال و نگهداری هیدروژن و نبود راه‌حل مناسب برای رفع این مشکلات تا به امروز، مانع استفاده‌ی گسترده و صنعتی هیدروژن شده است [۱۲، ۱۳].

متان، یکی از مورد استفاده‌ترین سوخت‌های حال حاضر در صنعت است که نسبت به هیدروژن، کمتر به عنوان افزونه مورد بررسی قرار گرفته است. اکافور و همکاران^{۱۴} [۶] در سال ۲۰۱۸ به بررسی احتراق مخلوط آمونیاک/متان و به ویژه سرعت شعله‌ی آن در دما و فشار اتاق پرداختند. همچنین در این پژوهش مکانیزمی به منظور شبیه‌سازی رفتار این مخلوط ارائه شد. همین گروه در بررسی دیگری در سال ۲۰۱۹ [۱۴] به بررسی

آمونیاک یک سوخت با پتانسیل برای جایگزینی سوخت‌های هیدروکربنی مرسوم، به منظور دستیابی به اقتصاد کم‌کربن محسوب می‌شود. به منظور استفاده‌ی صنعتی از این سوخت، نیازمند اطلاعات و درک از ویژگی‌های احتراقی این سوخت هستیم، به همین منظور، در این پژوهش سرعت شعله‌ی مخلوط آمونیاک/متان در شرایط پیش‌گرمایش به صورت عددی مورد بررسی قرار گرفته است. چهار مکانیزم Okafor، San Diego، reduced Okafor و GRI-Mech 3.0 برای این پژوهش انتخاب شده‌اند که با مقایسه‌ی اولیه‌ی مقادیر محاسبه شده توسط این مکانیزم‌ها با مقادیر تجربی موجود در ادبیات موضوع، دو مکانیزم reduced Okafor و GRI-Mech 3.0 به منظور بررسی رفتار سرعت شعله‌ی آمونیاک/متان در شرایط پیش‌گرمایش مورد استفاده قرار گرفتند. نتایج نشان می‌دهند که پیش‌گرمایش باعث افزایش سرعت شعله خواهد شد. پیش‌گرمایش اثرگذاری بیشتری در شرایط کم‌سوخت و پرسوخت نسبت به حالت استوکیومتری داراست. همچنین با پیش‌گرمایش مخلوط آمونیاک/متان در کسر مولی ۰/۲ متان در شرایط استوکیومتری تا دمای ۶۰۰ کلوین، سرعت شعله‌ی این مخلوط به حدود سرعت شعله‌ی متان خالص می‌رسد.

کلمات کلیدی: آمونیاک، متان، سرعت شعله، احتراق پیش‌گرم، مکانیزم کاهیده

مقدمه

با حرکت به سمت اقتصاد و صنعت کم‌کربن، نیاز به سوخت‌های کم‌کربن یا بی‌کربن^۱ افزایش یافته است. هیدروژن یکی از شناخته‌شده‌ترین سوخت‌های بدون کربن محسوب می‌شود. با این وجود، هیدروژن به دلیل داشتن انرژی حجمی پایین نیازمند تجهیزات پیشرفته برای نگهداری و انتقال است و همچنین به دلیل محدوده‌ی اشتعال‌پذیری گسترده‌ی آن، خطر انفجار بالایی دارد. آمونیاک با داشتن ۱۷/۷ درصد حجمی هیدروژن، در ابتدا گزینه مناسبی به عنوان حامل هیدروژن به منظور انتقال و نگهداری ارزان‌تر و امن‌تر معرفی شد [۱، ۲]. افزایش تقاضا برای سوخت‌های کم‌کربن، توجه را به سمت استفاده از آمونیاک به عنوان سوخت مستقیم جلب کرد. بیش از ۱۰۰ سال است که از آمونیاک به عنوان کود شیمیایی، ماده‌ی خام شیمیایی و مبرد مورد استفاده قرار می‌گیرد. به دلیل همین سابقه‌ی بلندمدت استفاده از آمونیاک، زیرساخت‌های تولید، نگهداری و پخش آمونیاک موجود می‌باشد [۱، ۳].

اگرچه آمونیاک یک سوخت بی‌کربن مطلوب از لحاظ نگهداری و انتقال محسوب می‌شود ولی از طرف دیگر، خصوصیات احتراقی آمونیاک مطلوب نیست که از جمله‌ی آن می‌توان به سرعت شعله‌ی پایین (حدود یک‌پنجم متان)، ارزش حرارتی پایین، گستره‌ی اشتعال‌پذیری محدود^۲ و حداقل انرژی احتراق بالا^۳ اشاره کرد [۴، ۵].

⁸ Hayakawa et al.

⁹ Han et al.

¹⁰ Lee et al.

¹¹ Ichikawa et al.

¹² Kumar and Meyer

¹³ Li et al.

¹⁴ Okafor et al.

¹ Low-carbon or carbon-free fuels

² Narrow flammability range

³ High minimum ignition energy

⁴ Additive

⁵ Flashback

⁶ Blowoff

⁷ Flame stabilization

پیش‌گرمایش، دما از ۲۹۸ تا ۶۰۰ کلوین افزایش یافته و فشار ۱ اتمسفر بدون تغییر باقی مانده است.

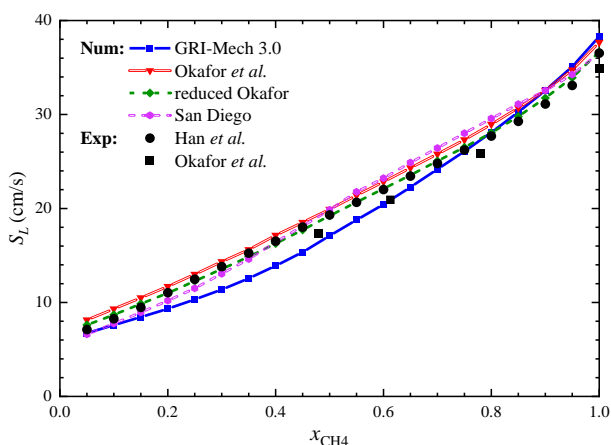
نتایج

مقایسه‌ی مکانیزم‌ها از نظر دقت عملکرد

در ابتدا، داده‌های حاصل از شبیه‌سازی مکانیزم‌ها با داده‌های تجربی موجود در پژوهش‌های پیشین، به منظور اعتبارسنجی و تعیین بهترین مکانیزم از نظر دقت شبیه‌سازی، مقایسه شدند.

شکل ۱ سرعت شعله‌ی احتراق استوکیومتری آمونیاک/متان به ازای کسر مولی‌های مختلف متان، محاسبه شده توسط چهار مکانیزم نام‌برده در بخش مدل‌سازی جنبشی و داده‌های تجربی حاصل از پژوهش‌های هان و همکاران [۱۵] و آکافور و همکاران [۶] را نمایش می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود توافق خوبی بین داده‌های تجربی در تعیین مقدار سرعت شعله وجود دارد. همچنین با مقایسه‌ی مقادیر محاسبه شده توسط مکانیزم‌ها با داده‌های تجربی، مشاهده می‌شود که مکانیزم‌ها با دقت قابل قبولی سرعت شعله را پیش‌بینی می‌کنند، غیر از GRI-Mech 3.0 که برای $0.15 < x_{CH_4} < 0.2$ سرعت شعله را بیش از مقادیر تجربی پیش‌بینی می‌کند. علاوه بر آن، مقادیر سرعت شعله‌ی آمونیاک/متان نشان می‌دهد که سرعت شعله‌ی این مخلوط نسبت به کسر مولی متان تابعیتی تقریباً خطی دارد.

در شکل ۲، داده‌های تجربی سرعت شعله‌ی آمونیاک/متان پژوهش هان و همکاران [۱۵] با تابعیت نسبت هم‌ارزی و به ازای کسر مولی‌های ۰/۴، ۰/۶ و ۰/۸ متان با مقادیر محاسبه شده توسط چهار مکانیزم مقایسه شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود تقریباً در تمامی شرایط به ویژه $1/2 < \phi$ ، مکانیزم reduced Okafor بهترین عملکرد را داراست. البته در کسر مولی ۰/۸ متان و به خصوص در نسبت هم‌ارزی ۱/۴۰-۱/۱۵ مکانیزم GRI-Mech 3.0 عملکرد بهتری نسبت به مکانیزم reduced Okafor را نشان می‌دهد. این نتیجه می‌تواند نشان دهنده‌ی نقش غالب متان در احتراق مخلوط آمونیاک/متان در کسر مولی ۰/۸ و به طور ویژه در شرایط پرسوخت^۵ باشد. قابل توجه است که در تمامی کسر مولی‌ها، بیش‌ترین سرعت شعله در نسبت هم‌ارزی ۱/۰۵ رخ می‌دهد غیر از کسر مولی ۰/۲ که بیش‌ترین سرعت در نسبت هم‌ارزی ۱/۰ اتفاق می‌افتد.



شکل ۱: سرعت شعله‌ی استوکیومتری آمونیاک/متان نسبت به کسر مولی متان، x_{CH_4} اندازه‌گیری شده توسط هان و همکاران [۱۵] و آکافور و همکاران [۶]، و محاسبه شده توسط چهار مکانیزم معرفی شده.

ویژگی‌های احتراقی آمونیاک/متان، مانند سرعت شعله، در فشارهای بالا تا ۵ اتمسفر پرداختند. در این بررسی مکانیزم کاهیده‌ای^۱ بر اساس مکانیزم قبل نیز ارائه شد که نتایج شبیه‌سازی آن با داده‌های تجربی هم‌خوانی بالایی داشت. هان و همکاران^۲ [۱۵] نیز به طور خاص به بررسی سرعت شعله‌ی آمونیاک خالص، آمونیاک/هیدروژن، آمونیاک/کربن‌مونوکسید و آمونیاک/متان پرداختند. این پژوهش‌ها نشان دادند که اگرچه افزودن متان به آمونیاک به اندازه‌ی هیدروژن باعث افزایش سرعت شعله نخواهد شد ولی می‌توان با تعیین کسر مولی مناسبی از متان، به سرعت شعله‌های قابل قبولی دست یافت. همچنین سرعت شعله مخلوط آمونیاک/متان بر خلاف آمونیاک/هیدروژن با افزایش کسر مولی متان به شکل خطی افزایش می‌یابد. افزودن هیدروکربن‌هایی مانند متان به آمونیاک، منجر به تولید سوخت‌هایی کم‌کربنی می‌شود که از یک طرف باعث کاهش کربن‌دی‌اکسید تولیدی ناشی از احتراق هیدروکربن شده و از طرف دیگر باعث بهبود خصوصیات احتراقی آمونیاک خواهد شد. همچنین این امر ممکن است که بتوان از مخلوط آمونیاک/متان در محفظه‌های احتراق مرسوم که در حال حاضر متان خالص می‌سوزاند نیز استفاده کرد ولی به منظور بررسی چنین موضوعی، تحقیقات بیش‌تر برای دستیابی به درک کامل از ویژگی‌های احتراقی این مخلوط نیاز است.

در این پژوهش، سرعت شعله‌ی آمونیاک/متان و اثر پیش‌گرم کردن^۳ که تا به حال در پژوهش دیگری مورد بررسی قرار نگرفته است، برای غلظت‌های مختلف متان و همچنین گستره‌ی وسیعی از نسبت هم‌ارزی، از طریق شبیه‌سازی، مورد بررسی قرار گرفت. با مقایسه‌ی نتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی موجود در ادبیات موضوع، مکانیزم‌ها اعتبارسنجی شده و بهترین آنها به منظور بررسی اثر پیش‌گرم کردن بر سرعت شعله انتخاب شدند.

مدل‌سازی جنبشی^۴

در این پژوهش، مکانیزم‌های GRI-Mech 3.0 [۱۶]، Okafor [۶]، reduced Okafor [۱۴] و San Diego [۱۷] مورد استفاده قرار گرفته‌اند. مکانیزم GRI-Mech 3.0 به منظور بررسی احتراق متان توسعه یافته است و در ادبیات موضوع به طور گسترده اعتبارسنجی شده است. مکانیزم Okafor براساس مکانیزم GRI-Mech 3.0 و به همراه واکنش‌های مهم اکسایش آمونیاک مکانیزم Tian [۱۸] تولید شده است و به منظور بررسی شعله‌ی آمونیاک/متان ارائه شده است. مکانیزم reduced Okafor براساس مکانیزم Okafor تولید شده و به کمک داده‌های تجربی پژوهش آکافور و همکاران [۱۴] و همچنین داده‌های تجربی موجود در پیشینه‌ی موضوع، برای فشارهای بالا اعتبارسنجی و بهبود یافته و به طور کلی بهینه شده است. مکانیزم San Diego ترکیبی از مکانیزم فرعی نیتروژن، به‌روز رسانی شده در تاریخ ۲۰۱۸/۷/۲۳ و مکانیزم اصلی شامل گونه‌های کربن به‌روز رسانی شده در تاریخ ۲۰۱۶/۱۲/۱۴ است که در آن مکانیزم فرعی هیدروژن با هدف در نظر گرفتن احتراق آمونیاک تولید شده است [۱۹].

به منظور شبیه‌سازی و به‌کارگیری مکانیزم‌ها، از نرم‌افزار Ansys Chemkin Pro [۲۰] نسخه‌ی ۱۷ با GRAD و CURV برابر ۰/۱ استفاده شده است. در شبیه‌سازی‌ها و در شرایطی که پیش‌گرمایش انجام نشده است، دما و فشار به ترتیب ۲۹۸ کلوین و ۱ اتمسفر در نظر گرفته شده‌اند. در حالت

⁴ Kinetic modeling

⁵ Fuel-rich

¹ Reduced mechanism

² Han et al.

³ Preheating

و روند سرعت شعله، مکانیزم reduced Okafor بوده است. البته در بعضی حالات مانند کسر مولی ۰/۴ متان در فشار ۱ اتمسفر، مکانیزم reduced Okafor عملکرد بهتری نسبت به مکانیزم GRI-Mech 3.0 داده است. این نکته قابل توجه است که در فشار ۵ اتمسفر نیز همانند فشار ۱ اتمسفر، بیشترین مقدار سرعت شعله در نسبت هم‌آزای ۱/۰۵ رخ می‌دهد.

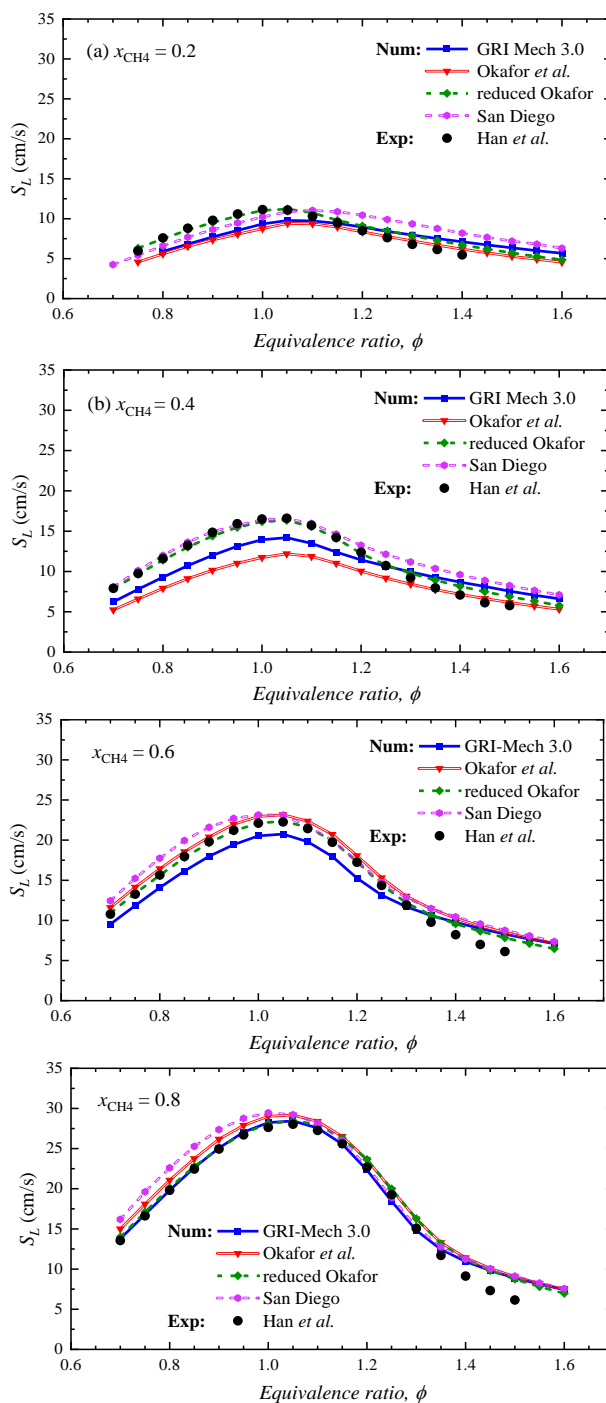
با توجه به داده‌های تجربی پژوهش‌های پیشین و مقادیر محاسبه شده توسط چهار مکانیزم، قابل مشاهده است که مکانیزم San Diego اگرچه روند تغییرات سرعت شعله را به درستی شبیه‌سازی می‌کند، ولی در بیش‌تر موارد مقادیر سرعت شعله را بیش از داده‌های تجربی محاسبه می‌کند. مکانیزم reduced Okafor در اکثر شرایط پیش‌بینی دقیق‌تری نسبت به سایر مکانیزم‌ها داشته است. این مکانیزم که نسخه‌ی به‌روز رسانی شده‌ی مکانیزم Okafor است، به وضوح نتایج بهتر و دقیق‌تری نسبت به مکانیزم Okafor ارائه می‌دهد. مکانیزم GRI-Mech 3.0 در شرایطی که مقدار آمونیاک در مخلوط آمونیاک/متان زیاد باشد، پیش‌بینی ضعیف‌تری نسبت به سایر مکانیزم‌ها نشان می‌دهد. البته با توجه به اینکه این مکانیزم به منظور شبیه‌سازی احتراق متان توسعه یافته است، با افزایش متان در مخلوط سوختی، دقت مقادیر محاسبه شده توسط این مکانیزم افزایش یافته و به نتایج تجربی نزدیک‌تر می‌شود، به طوری که در بعضی حالات مقادیر محاسبه شده توسط مکانیزم GRI-Mech 3.0 از مقادیر مکانیزم reduced Okafor نزدیک‌تر است.

با توجه به آنچه گفته شد، مکانیزم reduced Okafor به دلیل دقت بالا در پیش‌بینی سرعت شعله در اکثر موارد و مکانیزم GRI-Mech 3.0 به دلیل آنکه به طور اختصاصی برای سوخت متان توسعه یافته است و دارای دقتی بالا در شرایطی که مقدار متان در مخلوط سوختی آمونیاک/متان بالا می‌باشد دارا است، به عنوان دو مکانیزم پیش‌بینی کننده‌ی سرعت شعله در شرایط پیش‌گرمایش انتخاب شده‌اند.

اثر پیش‌گرم کردن بر سرعت شعله

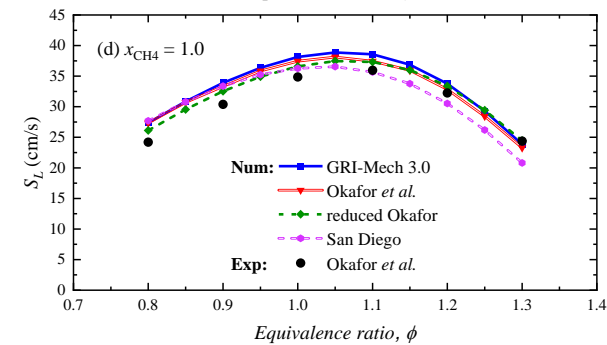
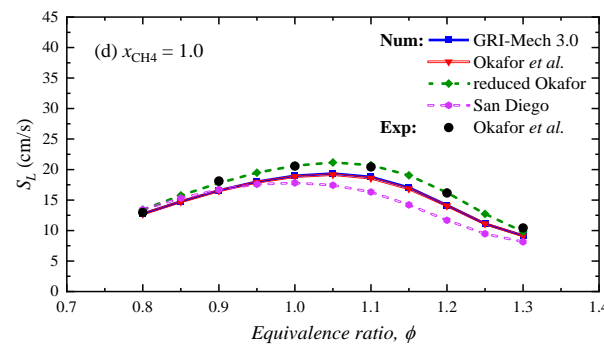
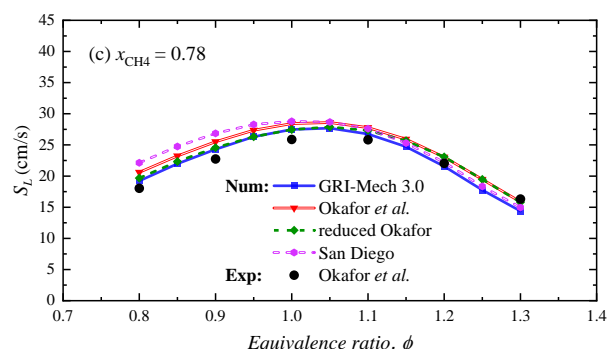
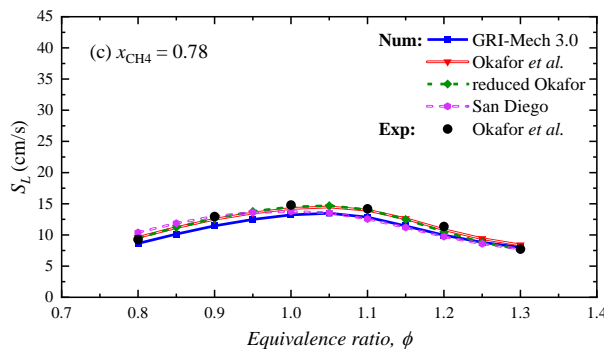
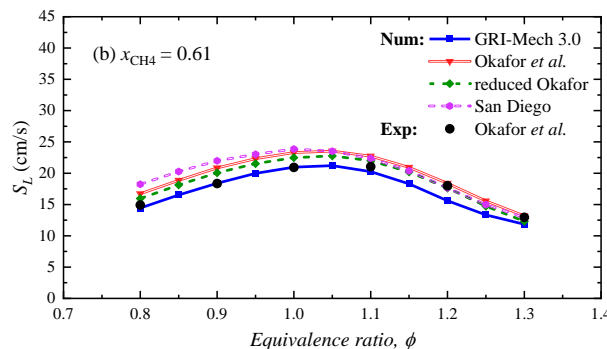
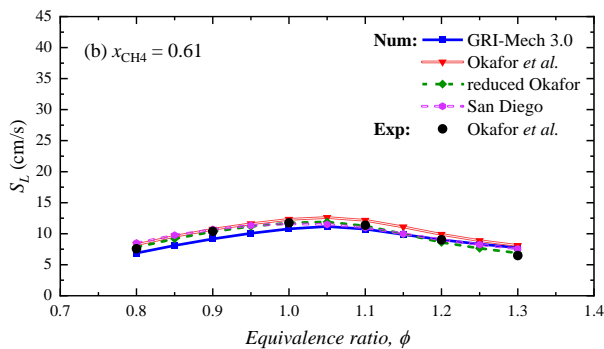
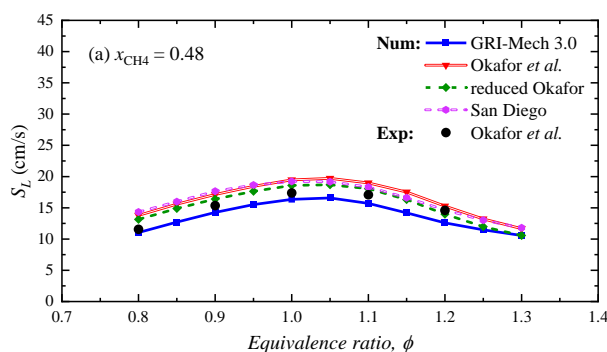
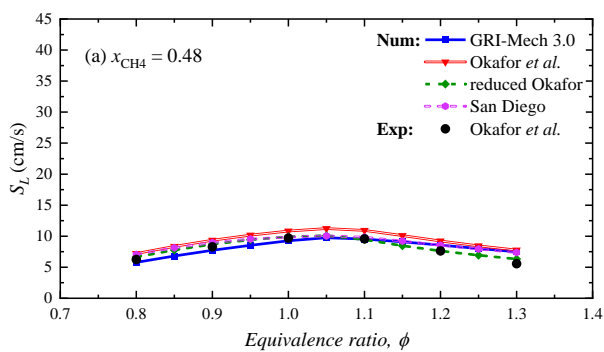
شکل ۵ اثر پیش‌گرم کردن بر سرعت شعله را به ازای نسبت هم‌آزای و کسر مولی‌های مختلف متان نمایش می‌دهد. مطابق انتظار با افزایش میزان پیش‌گرم کردن، سرعت شعله، مستقل از کسر مولی متان افزایش می‌یابد. اختلاف بین مقادیر محاسبه شده توسط دو مکانیزم انتخاب شده در کسر مولی‌های پایین متان بالاست. با افزایش کسر مولی متان، اختلاف مقادیر پیش‌بینی شده توسط مکانیزم‌ها کاهش یافته و به خصوص در کسر مولی ۰/۸ متان، دو مکانیزم مقادیر تقریباً مشابهی رو محاسبه کرده‌اند. این موضوع مورد انتظار است زیرا همانطور که پیش‌تر اشاره شد، با افزایش کسر مولی متان، متان نقش غالب را در تعیین ویژگی‌های احتراقی مخلوط سوختی خواهد داشت و بنابراین، با توجه به آنکه مکانیزم GRI-Mech 3.0 به منظور پیش‌بینی خصوصیات ویژگی‌های احتراقی متان خالص توسعه یافته است، انتظار می‌رود که این مکانیزم در مقادیر بالای کسر مولی متان نتایج تقریباً دقیقی ارائه دهد.

باید توجه داشت که در کسر مولی ۰/۲ متان، با افزایش دمای پیش‌گرمایش به ۶۰۰ کلوین در شرایط استوکیومتری، سرعت شعله‌ی مخلوط سوختی آمونیاک/متان به حدود ۴۵ سانتی‌متر بر ثانیه می‌رسد، یعنی سرعت شعله‌ای در حدود سرعت شعله‌ی متان خالص. این نتیجه به این معنی است که می‌توان با مصرف کمتر متان و در نتیجه تولید گازهای گلخانه‌ای کمتر، به ویژگی‌های احتراقی تقریباً مشابهی با متان خالص دست یافت. البته این نکته



شکل ۲: سرعت شعله‌ی آمونیاک/متان به ازای نسبت هم‌آزای و کسر مولی‌های مختلف متان، x_{CH_4} اندازه‌گیری شده توسط هان و همکاران [۱۵] و محاسبه شده توسط چهار مکانیزم در دمای ۲۹۸ کلوین و فشار ۱ اتمسفر.

در شکل ۳، داده‌های تجربی سرعت شعله‌ی آمونیاک/متان پژوهش آکافور و همکاران [۶] و نتایج شبیه‌سازی چهار مکانیزم در فشار ۱ اتمسفر با تابعیت نسبت هم‌آزای و کسر مولی‌های مختلف متان نمایش داده شده است. در شکل ۴ نیز داده‌های تجربی سرعت شعله‌ی آمونیاک/متان پژوهش آکافور و همکاران [۱۴] و نتایج شبیه‌سازی چهار مکانیزم در فشار ۵ اتمسفر با تابعیت نسبت هم‌آزای و کسر مولی‌های مختلف متان نمایش داده شده است. همان‌طور که در این دو شکل مشاهده می‌شود با افزایش فشار، سرعت شعله کاهش و با افزایش کسر مولی متان سرعت شعله افزایش می‌یابد. در تمامی حالات و به خصوص در فشار ۵ اتمسفر، بهترین مکانیزم در پیش‌بینی مقدار

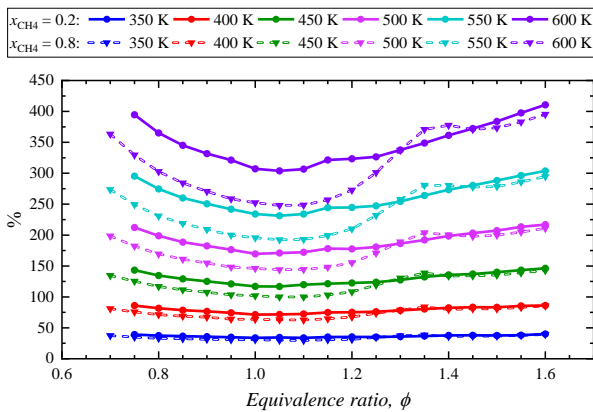


شکل ۴: سرعت شعله‌ی آمونیاک/متان به ازای نسبت هم‌ارزی و کسر مولی‌های مختلف متان، x_{CH_4} اندازه‌گیری شده توسط آکافور و همکاران [۱۴] و محاسبه شده توسط چهار مکانیزم در دمای ۲۹۸ کلوین و فشار ۵ اتمسفر.

شکل ۳: سرعت شعله‌ی آمونیاک/متان به ازای نسبت هم‌ارزی و کسر مولی‌های مختلف متان، x_{CH_4} اندازه‌گیری شده توسط آکافور و همکاران [۶] و محاسبه شده توسط چهار مکانیزم در دمای ۲۹۸ کلوین و فشار ۱ اتمسفر.

مؤثر بودن پیش‌گرمایش به منظور استفاده‌ی صنعتی و گسترده‌ی مخلوط آمونیاک/متان باشد. هم‌چنین در کسر مولی پایین متان، پیش‌گرمایش تأثیر به مراتب بالاتری نسبت به کسر مولی بالای متان نشان می‌دهد. این مورد یافته‌ی مفید و مهم دیگری است که نشان می‌دهد در شرایطی که در مخلوط سوختی درصد کمی متان وجود دارد می‌توان با پیش‌گرمایش، به خصوص در شرایط کم‌سوخت، تا حد مطلوبی سرعت شعله را افزایش داد و بر ویژگی‌های احتراقی ضعیف آمونیاک غلبه کرد.

که به منظور چنین پیش‌گرمایشی چه مقدار انرژی مورد نیاز است و آیا این میزان مصرف انرژی برای پیش‌گرم کردن از نظر اقتصادی عملی است یا خیر می‌بایست مورد بررسی و امکان‌سنجی اقتصادی و مهندسی قرار گیرد. شکل ۶ میزان افزایش سرعت شعله‌ی آمونیاک/متان برای کسر مولی ۰/۲ و ۰/۸ متان به ازای مقادیر مختلف پیش‌گرمایش را نمایش می‌دهد. طبق آن، پیش‌گرمایش در شرایط کم‌سوخت و پرسوخت اثرگذاری بیشتری نسبت به شرایط استوکیومتری دارد. با توجه به آنکه در اکثر کاربردهای صنعتی سوخت در شرایط کم‌سوخت سوزانده می‌شود، این یافته می‌تواند تأییدی بر



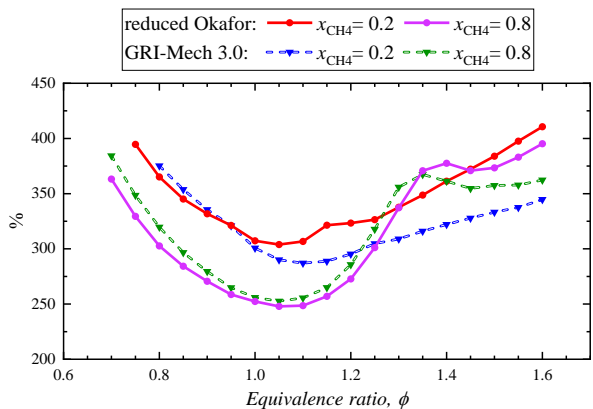
شکل ۶: میزان افزایش سرعت شعله‌ی آمونیاک/متان در شرایط پیش‌گرمایش مختلف، از ۳۵۰ تا ۶۰۰ کلوین، محاسبه شده توسط مکانیزم reduced Okafor در فشار ۱ اتمسفر.

کسر مولی ۰/۲، به ویژه در شرایط استوکیومتری و پرسوخت، مقادیر کاملاً متفاوتی ارائه می‌دهند. مکانیزم reduced Okafor تقریباً در تمامی نسبت هم‌ارزی‌ها، پیش‌گرمایش ۶۰۰ کلوینی در کسر مولی ۰/۲ را مؤثرتر پیش‌بینی کرده است درحالی‌که مکانیزم GRI-Mech 3.0 در نسبت هم‌ارزی بزرگتر از ۰/۲، این میزان پیش‌گرمایش را برای کسر مولی ۰/۸ مؤثرتر محاسبه کرده است.

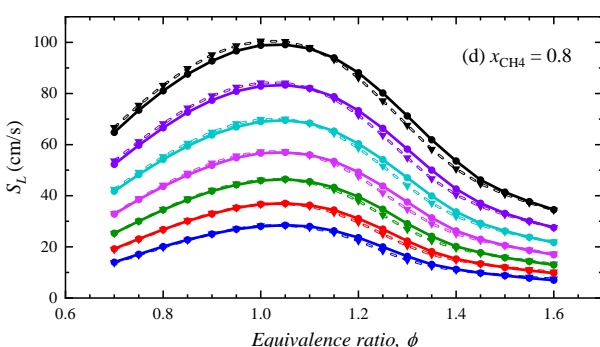
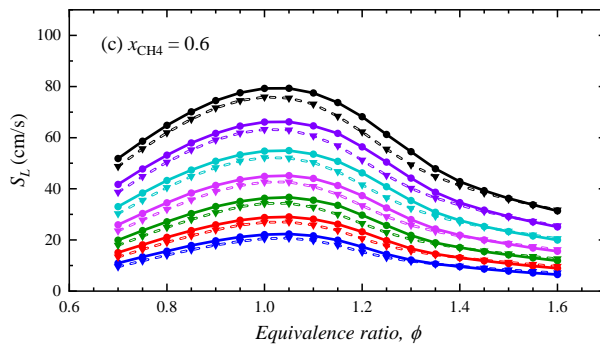
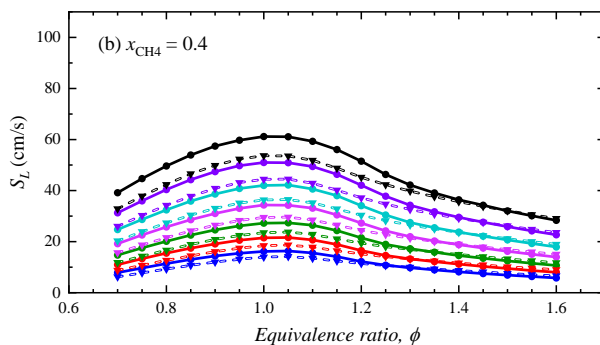
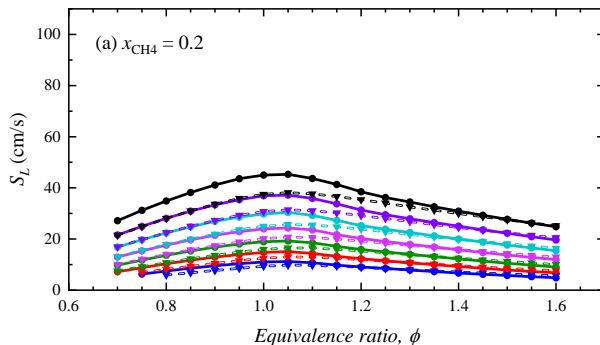
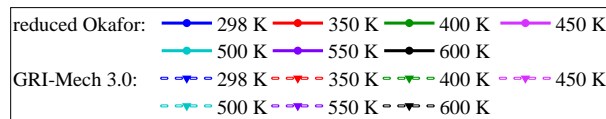
به دلیل نبود داده‌های تجربی در شرایط پیش‌گرمایش، امکان بررسی دقت مقادیر سرعت شعله‌ی محاسبه شده توسط مکانیزم‌ها وجود ندارد، به همین خاطر تحقیق‌های تجربی بیش‌تری در این زمینه به منظور بررسی دقت مکانیزم‌ها و بررسی دقیق‌تر اثر پیش‌گرمایش مورد نیاز است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش چهار مکانیزم از دقیق‌ترین مکانیزم‌های موجود در ادبیات موضوع، به منظور بررسی رفتار سرعت شعله‌ی مخلوط آمونیاک/متان انتخاب شدند. با مقایسه‌ی داده‌های تجربی با مقادیر محاسبه‌شده توسط این مکانیزم‌ها در شرایط مختلف (نسبت هم‌ارزی‌ها و فشارهای مختلف)، دو مکانیزم reduced Okafor و GRI-Mech 3.0 به منظور پیش‌بینی سرعت شعله‌ی این مخلوط در شرایطی که پیش‌گرمایش تا دمای ۶۰۰ کلوین رخ دهد انتخاب شدند. نتایج حاصل نشان‌دهنده‌ی اثرگذاری بالای پیش‌گرمایش بر سرعت شعله‌ی این مخلوط سوختی است به طوری که در کسر مولی ۰/۲، متان و در شرایط استوکیومتری، با پیش‌گرمایش تا دمای ۶۰۰ کلوین،



شکل ۷: میزان افزایش سرعت شعله‌ی آمونیاک/متان در شرایط پیش‌گرمایش ۶۰۰ کلوین، محاسبه شده توسط دو مکانیزم reduced Okafor و GRI-Mech 3.0 در فشار ۱ اتمسفر.



شکل ۵: سرعت شعله‌ی آمونیاک/متان به ازای نسبت هم‌ارزی و کسر مولی‌های مختلف متان، x_{CH_4} ، در شرایط پیش‌گرمایش مختلف، از ۲۹۸ تا ۶۰۰ کلوین، محاسبه شده توسط دو مکانیزم reduced Okafor و GRI-Mech 3.0 در فشار ۱ اتمسفر.

در شکل ۷، میزان افزایش سرعت شعله‌ی محاسبه شده به وسیله‌ی دو مکانیزم reduced Okafor و GRI-Mech 3.0 در پیش‌گرمایش ۶۰۰ کلوینی و کسر مولی ۰/۲ و ۰/۸ متان مقایسه شده‌اند. مطابق انتظار، در کسر مولی بالای متان این دو مکانیزم روند حدوداً مشابهی ارائه می‌دهند ولی در

- 14- E.C. Okafor , Y. Naito , S. Colson , A. Ichikawa , T. Kudo , A. Hayakawa , H. Kobayashi , measurement and modeling of the laminar burning velocity of methane-ammonia-air flames at high pressures using reduced reaction mechanism, *Combust. Flame* 204 (2019) 162-175.
- 15- Han X, Wang Z, Costa M, Sun Z , He Y, Cen K. Experimental and kinetic modeling study of laminar burning velocities of NH₃/air, NH₃/H₂/air, NH₃/CO/air and NH₃/CH₄/air premixed flames. *Int J Combustion and Flame* 2019;206:214-226.
- 16- G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Golden- berg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W. Gardiner Jr, GRI-Mech 3.0, 1999, combustion.berkeley.edu/gri_mech, (2011).
- 17- U. Mechanism, Chemical-kinetic mechanisms for combustion applications, me- chanical and aerospace engineering (combustion research), University of California at San Diego, 2014.
- 18- <https://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html>
- 19- Z. Tian , Y. Li , L. Zhang , P. Glarborg , F. Qi , An experimental and kinetic modeling study of premixed NH₃ /CH₄ /O₂ /Ar flames at low pressure, *Combust. Flame* 156 (2009) 1413-1426.
- 20- Han X, Wang Z, Costa M, Sun Z , He Y, Cen K. Experimental and kinetic modeling study of laminar burning velocities of NH₃/air, NH₃/H₂/air, NH₃/CO/air and NH₃/CH₄/air premixed flames. *Int J Combustion and Flame* 2019;206:214-226.
- 21- ANSYS Chemkin-Pro® Release 17.0 (Chemkin-Pro 15151) ANSYS, Inc. (2016-01-11).

سرعت شعله‌ی این مخلوط به حدود سرعت شعله‌ی متان خالص خواهد رسید. با چنین میزان پیش‌گرمایی، می‌توان با مصرف کمتر متان و در نتیجه تولید گاز گلخانه‌ای کمتر، به سرعت شعله‌ای مشابه متان خالص دست یافت. اثرگذاری پیش‌گرم کردن در حالت‌های کم‌سوخت و پرسوخت بیش از شرایط استوکیومتری است و علاوه بر آن، پیش‌گرمایش در کسر مولی پایین متان مؤثرتر از کسر مولی بالای متان است.

مراجع

- Zamfirescu, C., Dincer, I., 2009, "Ammonia as a green fuel and hydrogen source for vehicular applications", *Fuel Processing Technology*, 90, 729-737.
- Goshome, K., Yamada, T., Miyaoka, H., Ichikawa, T., Kojima, Y., 2016, "High compressed hydrogen production via direct electrolysis of liquid ammonia", *Hydrogen Energy*, 41, 14529-14534.
- Kobayashi, H., Hayakawa, A., Somarathne, K.D.K.A, Okafor, E.C., 2009, "Science and Technology of ammonia combustion", *Proceedings of the Combustion Institute*, 37, 109-133.
- Verkamp, F.J., Hardin, M.C., Williams, J.R., 1967, "Ammonia combustion properties and performance in gas-turbine burners", *Symposium (International) on Combustion*, 11, 985-992.
- Hayakawa, A., Goto, T., Mimoto, R., Arakawa, Y., Kudo, T., Kobayashi, H., 2015, "Laminar burning velocity and Markstein length of ammonia/air premixed flames at various pressures", *Fuel*, 159, 98-106.
- E.C. Okafor, Y. Naito, S. Colson, A. Ichikawa, T. Kudo, A. Hayakawa, H. Kobayashi, 2018, "Experimental and numerical study of the laminar burning velocity of CH₄-NH₃-air premixed flames", *Combustion and Flame*, 187, 185-198.
- X. Han, Z. Wang, S. Wang, R. Whiddon, Y. He, Y. Lv, A. A. Konnov, 2019, "Parametrization of the temperature dependence of laminar burning velocity for methane and ethane flames", *Fuel*, 239, 1028-1037.
- J. Lee , J. Kim , J. Park , O. Kwon , Studies on properties of laminar premixed hydrogen-added ammonia/air flames for hydrogen production, *Int. J. Hydrogen Energy* 35 (2010) 1054-1064.
- A . Ichikawa , A . Hayakawa , Y. Kitagawa , K.K.A. Somarathne , T. Kudo , H. Kobayashi , Laminar burning velocity and Markstein length of ammonia/hydrogen/air premixed flames at elevated pressures, *Int. J. Hydrogen Energy* 40 (2015) 9570-9578.
- P. Kumar , T.R. Meyer , Experimental and modeling study of chemical-kinetics mechanisms for H₂-NH₃-air mixtures in laminar premixed jet flames, *Fuel* 108 (2013) 166-176.
- J. Li , H. Huang , N. Kobayashi , Z. He , Y. Nagai , Study on using hydrogen and ammonia as fuels: combustion characteristics and NO_x formation, *Int. J. Energy Res.* 38 (2014) 1214-1223.
- Lee JH, Lee SI, Kwon OC. Effects of ammonia substitution on hydrogen/air flame propagation and emissions. *Int J Hydrogen Energy* 2010;35(20): 11332e41.
- Lan R, Irvine JTS, Tao S. Ammonia and related chemicals as potential indirect hydrogen storage materials. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37(2):1482e94.