



Kinetic and Thermodynamic Study of the Combustion Characteristics of the Combination of Ammonia Fuel with Waste Gas at Elevated Pressures

ARTICLE INFO

Article Type

Original Research

Authors

Kiani M.¹,
Abbasian Arani A.A.^{1*},
Houshfar E.²,
Ashjaee M.².

How to cite this article

Kiani M, Abbasian Arani A.A, Houshfar E, Ashjaee M. Kinetic and Thermodynamic Study of the Combustion Characteristics of the Combination of Ammonia Fuel with Waste Gas at Elevated Pressures. Modares Mechanical Engineering; 2024;24(03):153-164.

¹Mechanical Engineering Faculty, University of Kashan, Kashan, Iran.

²Mechanical Engineering Faculty, University of Tehran, Tehran, Iran.

*Correspondence

Address: Mechanical Engineering Faculty, University of Kashan, Kashan, Iran.

abbasian@kashanu.ac.ir

Article History

Received: September 1, 2023

Accepted: May 12, 2024

ePublished: June 24, 2024

ABSTRACT

The great attention and interest of researchers to use ammonia in combustion systems as a carbon-free fuel for gas turbines, as well as the existence of developed infrastructure for its production, show the importance of present fuel and this issue. In addition, one of the best candidates for storing renewable energies on large scales or transporting them for long distances is doubtlessly Ammonia (NH₃). In gas turbines and boilers, adding landfill gas improve NH₃ reactivity effectively. The present effort studies NH₃/landfill mixtures' laminar flame propagation from 1 to 10 atm in an 11-liter constant volume combustion chamber using experimental approaches such as Mach-Zehnder and Schlieren interferometry method. The numerical study was performed using the Ansys Chemkin-Pro package via San Diego, Okafor, and GRI-Mech 3.0 mechanisms which can provide very accurate predictions for laminar burning velocities. The results indicated that the most considerable influence on increasing laminar burning velocities could be attributed to Ammonia concentration in the mixture. The experiments also showed that laminar burning velocity is reduced when the pressure is increased.

Keywords Laminar burning velocity, Landfill gas (LFG), Kinetic model, Elevated pressure

CITATION LINKS

1- Ammonia for Power” progress in ... 2- Science and technology of ammonia combustion 3- Laminar burning velocity and ... 4- Experimental and kinetic modeling investigation on ... 5- Experimental and kinetic modeling study of ... 6- Experimental and numerical study of ... 7- Measurement and modelling of ... 8- Laminar burning velocity and ... 9- Experimental investigation of ... 10- The effect of hydrogen addition on ... 11- Investigation of laminar flame speeds of ... 12- Laminar burning velocity measurements of ... 13- Experimental studies of ... 14- The behavior of methane/ ... 15- Effects of dilution on ... 16- Effect of Dilution by Nitrogen and ... 17- An experimental and numerical study on ... 18- experimental investigations on ... 19- Physical and Chemical Effects of CO₂ and ... 20- Numerical Study on the Effects of Diluents on ... 21- Optical Methods in Heat Transfer 22- Mach-Zehnder interferometer errors resulting from ... 23- Release 17.0 (Chemkin-Pro 15151) ANSYS 24- Ansys Inc. Ansys Chemkin-Pro. Chemistry ... 25- COMPARISON OF CHEMICAL KINETIC MECHANISMS FOR ... 26- Experimental and Numerical Investigation of ... 27- Experimental Measurement of ... 28- The use of expanding spherical flames to ... 29- Flames as gasdynamic discontinuities 30- Experimental investigation on ... 31- Burning velocity of turbulent premixed flames in ... 32- A comprehensive review of measurements and ... 33- On the accuracy of laminar flame speeds measured from ... 34- Radiation-induced uncertainty in ... 35- Effect of cylindrical confinement on ... 36- Effect of gravity on ... 37- Nonlinear effects in ... 38- Numerical study assessing various ammonia/ ... 39- Chemical-looping combustion process: ... 40- Dynamic Behaviors in Methane MILD and ... 41- Effect of Iron Ores and ... 42- Diffusion: mass transfer in fluid systems 43- Diffusion: mass transfer in fluid systems 44- Application of the Second Law of Thermodynamics and ...

مطالعه سینتیکی و ترمودینامیکی مشخصات احتراقی ترکیب سوخت آمونیاک با گاز زیاله در فشارهای افزایش یافته

مهرداد کیانی^۱، علی اکبر عباسیان آرائی^{۱*}، احسان هوشفر^۲، مهدی اشجعی^۲

^۱ دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

^۲ دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران، ایران

چکیده

توجه و علاقه زیاد پژوهشگران برای استفاده از آمونیاک در سیستم‌های احتراقی به عنوان سوختی بدون کربن برای توربین‌های گازی و همچنین وجود زیرساخت‌های توسعه یافته برای تولید آن نشان از اهمیت این نوع از سوخت و این موضوع است. بعلاوه یکی از بهترین کاندیدها برای ذخیره کردن انرژی‌های تجدید پذیر در مقیاس‌های بزرگ یا حمل‌های با فواصل زیاد، بدون شک می‌تواند آمونیاک باشد. در توربین‌های گازی و بویلرها، افزودن گازهای زیاله می‌تواند واکنش پذیری آمونیاک را به طرز مؤثری بهبود بخشد. در این مطالعه، شاخصه‌های احتراقی مخلوط آمونیاک/گاز زیاله/هوا بین فشار ۱ تا ۱۰ اتمسفر را درون یک محفظه احتراق با حجم ثابت ۱۱ لیتر با استفاده از روش‌های آزمایشگاهی اینترفرومتری ماخ-زندر و شلیرن مورد بررسی قرار گرفته است. بخش عددی این مطالعه با استفاده از نرم‌افزار کمکین - پرو از پکیج انسیس از طریق مکانیسم‌های سن دیگو، اکافور و مکانیزم جی آر آی ۳ و انجام شده است که قادر به پیش‌بینی دقیقی از سرعت‌های شعله هستند. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که بیشترین تأثیر بر روی سرعت شعله ناشی از تغییر در غلظت آمونیاک موجود در مخلوط می‌باشد. همچنین، به این نتیجه رسیده شد که سرعت شعله با افزایش فشار به تدریج کاهش می‌یابد.

کلیدواژه‌ها: سرعت شعله آرام، گاز زیاله، مدل سینتیکی، فشار افزایش یافته.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۶/۱۰

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۲/۲۳

*نویسنده مسئول: abbasian@kashanu.ac.ir

۱- مقدمه

اخیراً علاقه فراوانی برای استفاده از آمونیاک در سیستم‌های احتراقی به عنوان سوختی بدون کربن برای توربین‌های گازی و همچنین با توجه به زیرساخت‌های توسعه یافته برای تولید آن، همچنین ذخیره‌سازی و حمل و نقل آن وجود دارد [1,2]. استفاده از آمونیاک در سیستم‌های احتراقی همچنین با چالش‌هایی به دلیل محدودیت دامنه شعله‌وری کم و سرعت شعله پایین آن روبرو بوده است. مطالعات گذشته نشان می‌دهند که ترکیب‌های آمونیاک/هوا سرعت شعله پایینی (۶/۴ تا ۸/۱ سانتیمتر بر ثانیه) نسبت به سوخت‌های هیدروکربنی، گاز سنتز و هیدروژن از خود نشان می‌دهند [3-5]. از اینرو، تحقیقات باید در خصوص افزایش واکنش‌پذیری سیستم‌های احتراقی با گاز پایه‌ای آمونیاک انجام شوند. پژوهش‌ها نشان داده‌اند که افزایش مقدار سوخت و

غنی‌سازی آن با اکسیژن [4] می‌تواند سرعت احتراق شعله آمونیاک را تا حد قابل قبولی بهبود بخشد [5-7]. از اینرو در این مطالعه به استفاده از ترکیب سوخت آمونیاک با یک سوخت بیوگاز (گاز لندفیل) پرداخته شده است. تا کنون تحقیقات گسترده‌ای در مورد مشخصات احتراقی سوخت‌های جایگزین که قابلیت تجدید پذیری و سازگاری با محیط زیست را دارند، انجام شده است، که در میان آنها بیوگاز به دلیل منابع فراوان آن (که به سرعت از پسماندهای زیستی تولید می‌شود)، ترجیح داده می‌شود. ترکیب بیوگاز را اغلب به اندازه ۳۳٪ تا ۵۰٪ متان و مابقی آن به عنوان دی اکسید کربن تشکیل می‌شود. به منظور بهره‌وری بالا از این قبیل ترکیب‌ها در صنعت نیاز به بررسی مشخصات احتراقی شعله آنها می‌باشد [8]. مطالعه پیش رو به بررسی اثر اضافه کردن گاز آمونیاک به سوخت بیوگاز در غلظت‌های متفاوت می‌پردازد.

سرعت شعله آرام، به عنوان یک خصوصیت پایه‌ای هر سوخت، نیز یک ویژگی اساسی بیوگاز می‌باشد و بستگی به فشار، دما و به‌طور مهم‌تر، ترکیب مواد واکنش‌دهنده آن دارد، که آن را به عنوان پارامتری مهم در ارزیابی واکنش‌پذیری سوخت برای مطالعه مکانیزم‌های واکنش‌های شیمیایی، تبدیل می‌کند [9]. علاوه بر این، از طریق سرعت شعله، اطلاعات مهمی در مورد پخش‌پذیری یا همان انتشار می‌توان استخراج کرد. با کمک این داده‌ها، انرژی آزاد شده در سوخت و سوزاندن یک ترکیب قابل سوخت خاص، به‌طور مستقیم کنترل می‌شود [10]. علاوه بر این، در مورد توربین‌های گازی، سرعت احتراق آرام شعله پیش‌ترکیب شده برای پیش‌بینی ناپایداری‌های از قبیل بلند شدن شعله و برگشت شعله استفاده می‌شود. علاوه بر این، به‌طور کلی، از این داده برای بررسی پایداری شعله و محدوده شعله‌وری، و همچنین تایید و ساخت مدل‌های دینامیک شیمیایی استفاده می‌شود [11]. به منظور بررسی راهکارهایی برای اثر بخش‌تر کردن استفاده از این سوخت‌ها، چندین مطالعه انجام شده است تا ویژگی‌های شعله‌ای ترکیبات مختلف سوخت گاز زیاله را مورد بررسی قرار دهند. از پارامترهای مهم مورد بررسی در این مطالعه می‌توان به بررسی سرعت شعله و دمای حاصله از آن در فشارهای افزایش یافته برای سوخت مخلوط آمونیاک/بیوگاز پرداخته شده است. برای توصیف تأثیر ماده اختلاطی بر سرعت احتراق شعله متان و بررسی راهکارهای استفاده بهینه‌تر از سوخت گاز زیاله، محققان به طور گسترده‌ای ویژگی‌های شعله گاز زیاله را در ترکیبات مختلف را مورد مطالعه قرار داده‌اند. سرعت احتراق شعله متان و مخلوط‌های دی‌اکسیدکربن تا دماهای ۴۵۰ کلوین و فشارهای تا ۴ بار و نسبت هم ارزی با محدوده‌ای بین ۰/۷ تا ۱/۴ توسط هینتون و استون [12] با استفاده از روش‌های اینترفرومتری مورد بررسی قرار گرفت. با این حال، در این کار، تنها ترکیب معمولی ۴۰ درصد دی‌اکسیدکربن و ۶۰ درصد حجم مولی متان مورد بررسی قرار گرفت و محدوده‌های بیشتری به بحث گذاشته نشده است. محدوده پایداری شعله پیش‌ترکیب شده

ترمودینامیکی شاخصه‌های احتراقی شعله مخلوط می‌پردازد. همچنین در روشی مشابه اثر اضافه کردن آمونیاک به گاز پایه‌ای لندفیل مورد بحث و بررسی قرار گرفته است. از طرفی دیگر این مطالعه به بررسی سینتیکی اثر فشار و اضافه کردن گاز آمونیاک به سوخت پایه‌ای بیوگاز می‌پردازد. از اینرو از آنالیز حساسیت با استفاده از نرم افزار کمکین استفاده شده است.

۲- تجهیزات آزمایشگاهی

در این مطالعه، یک محفظه احتراق ساخته شده از فولاد به شکل استوانه‌ای با طول ۲۸۰ میلی‌متر، قطر داخلی ۲۲۵ میلی‌متر و حجم ۱۱ لیتر برای آزمایش‌ها طراحی شده است. از میله‌های فولاد ضدزنگ برای ساخت الکترودها در سیستم راه‌اندازی جرقه زن استفاده شده است. سوزن‌های جرقه زن در دو طرف متفاوت محفظه در سوراخ‌های هم محور قرار داده شده‌اند. یک مدار تخلیه خازنی (فاصله الکترودها ۰/۵ میلی‌متر تا ۲ میلی‌متر) برای ایجاد جرقه با ولتاژ تخلیه ۱۰ کیلوولت استفاده شده است. کمپنه انرژی لازم با توجه به نوع سوخت بین ۰/۵ تا ۳/۲ ژول متغیر می‌باشد.

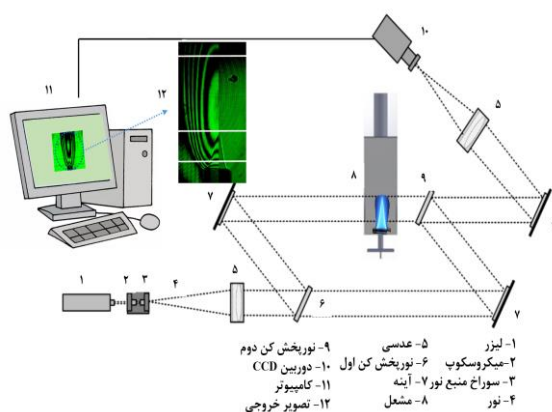
از نظر ظاهری، محفظه احتراق با قطر ۸۰ میلی‌متر و طول ۱۰۰ میلی‌متر به دو پنجره کوارتزی تجهیز شده است، هرکدام روی یک طرف جداگانه قرار دارند و همچنین سه اتصال در بخش فوقانی محفظه طراحی شده اند، یکی برای ورودی، یکی برای خروجی و یکی به عنوان سوپاپ ایمنی (هنگامی که فشار بالاتر از ۵۰ بار باشد به کار می‌رود). از شیرهای فشار-دما بالا برای جداسازی محفظه احتراق از خروجی و ورودی استفاده شده و دو حسگر فشار قبل از آن‌ها قرار گرفتند تا فشار داخل را بررسی نمایند. با عبور از سرپوش خروجی ترموکوپل نوع K به محفظه احتراق، امکان دریافت اندازه‌گیری دقیق دمای داخلی اولیه محفظه احتراق را با دقت ± 5 می‌دهد. قبل از هر آزمایش، دریچه محفظه با اتصال به یک پمپ خلاء تخلیه کامل می‌شود. پس از هر آزمایش، اتاق با هوا مجدداً پر شده و به طور دوره‌ای تخلیه شده تا محصولات احتراق باقی مانده در محفظه احتراق را از بین ببرند و دیواره‌های داخلی اتاق را سرد کنند. قبل از انجام هر آزمایش، مخلوط به مدت بیست دقیقه درون محفظه نگه داشته می‌شود تا کاملاً مخلوط همگن شود. در این مقاله، آزمایش‌ها سه تا پنج بار برای هر یک از موارد تجربی تکرار شد تا مقدار عدم قطعیت را کاهش دهد و مقادیر میانگین گزارش شد.

برای اندازه‌گیری دقیق فشار درون سیلندر، از یک حسگر فشار مطلق (بازه ۰ تا ۱/۱ بار) و یک حسگر فشار نسبی (بازه فشار محیط تا ۱۰ بار) استفاده شده تا به ما در خوانش فشار جزئی و تهیه ترکیبات مختلف کمک کند. از یک سنسور فشار دینامیکی پیزوالکتریک دما-بالا، با قابلیت اندازه‌گیری فشار گذرا استفاده شده است که حداکثر تغییرات ملاحظه شده به ۲ درصد محدود شد. از اینرو فرض انتشار شعله با فشار ثابت را تایید می‌شود.

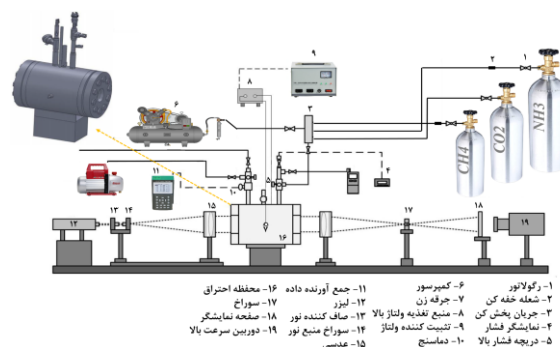
بیوگاز در یک مشعل آزمایشی مرجع در فشار اتمسفری توسط دای و قین [13] با استفاده از شش ترکیب مختلف بیوگاز مورد بررسی قرار گرفت. زانگ و شن [14] با آزمایش ترکیبات سوختی مختلف با افزودن دی‌اکسیدکربن که از ۰ تا ۱۵ درصد حجم مولی متغیر بود (غیر از ترکیبات زیاله‌زدایی)، سرعت احتراق آرام شعله‌های پیش‌ترکیب شده متان/هوا چگونه با افزودن دی‌اکسیدکربن در شرایط جوی را مورد بررسی قرار دادند. گالمیش و همکاران [15]، از طریق انجام آزمایشات تجربی در فشار اتمسفری و محیطی درصد دی‌اکسیدکربن از ۰ تا ۲۰ درصد حجم مولی را تغییر دادند و بررسی کردند که چگونه سرعت احتراق شعله آرام پیش‌ترکیب شده متان/هوا با اختلاط هلیوم، آرگون، دی‌اکسیدکربن، نیتروژن و بخار آب تغییر می‌کند. همچنین، تأثیر اختلاط دی‌اکسیدکربن و نیتروژن بر سرعت احتراق شعله‌های هوا/متان و هوا/ایزواکتان به صورت تجربی و عددی (با استفاده از کد پری میکس از بسته انسپس کمکین پرو توسط هالتر، فوشه [16] بررسی شد. آن‌ها آزمایشات خود را در شرایط محیطی و با محتوای دی‌اکسیدکربن در بازه ۰ تا ۲۰ درصد حجم مولی و با تغییر نسبت هم ارزی و سرعت ورودی انجام دادند. نتیجه بدست آمده در تلاش آن‌ها این بود که ساختار شعله بسیار وابسته به سرعت ورودی و نسبت هم ارزی است در حالی که بالاترین دمای شعله مستقل از اولی و بسیار وابسته به دومی است. این مطالعه به بررسی سینتیکی و ترمودینامیکی مخلوط آمونیاک/بیوگاز در فشارهای بالا و غلظت آمونیاک‌های متفاوت می‌پردازد.

کیانی و همکاران [17,18] توزیع دمای شعله خالص در مشعل‌های متقاطع را بررسی کردند. آن‌ها سرعت ورودی و نسبت هم ارزی سوخت به هوا را تغییر دادند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که بیشینه دمای شعله به شدت وابسته به نسبت هم ارزی ورودی است و مستقل از سرعت ورودی می‌باشد، در حالی که ساختار شعله به شدت وابسته به هر دوی آن‌ها می‌باشد. مشابهاً، وانگ و لیو [19] از روش‌های عددی بمنظور بررسی ساختار شعله‌ای از جریان پخش متان/دی‌تکسید کربن/آب در فشار و دمای محیط استفاده کردند. آن‌ها تغییر غلظت نسبت دی‌اکسیدکربن در مخلوط سوختی را از ۰ تا ۰/۶ بررسی کردند. هو، جیانگ [20] با تغییر غلظت دی‌اکسیدکربن در مخلوط سوختی از صفر تا ۲۰ درصد، تأثیر رقیق کننده‌ها (هلیوم/آرگون/نیتروژن/دی‌اکسید کربن) روی سرعت‌های احتراق مخلوط متان-هوا به صورت عددی بررسی کردند.

اگرچه تعداد قابل توجهی از مطالعات درباره ویژگی‌های احتراق متان و دی‌اکسیدکربن انجام شده است، اما در اکثر موارد این تحقیقات بیشتر درباره ترکیباتی بوده‌اند که بسیار متفاوت از ترکیبات نمونه‌ای سوخت گاز زیاله هستند. از آنجاییکه اطلاعات مربوط شاخصه‌های احتراقی از قبیل سرعت شعله آرام و دما برای ترکیب بیوگاز/آمونیاک در فشارهای بالا ناقص هستند، این مطالعه با استفاده از روش تجربی اینترفرومتری به بررسی



شکل (۱) چیدمان تجهیزات آزمایشگاهی



شکل (۲) چیدمان تجهیزات مرتبط با روش تصویربرداری ماخ-زندر

۳- مدل سازی

برای شبیه سازی یک شعله پیش مخلوط آدیاباتیک در حال انتشار، از الگوریتم یک بعدی و پایدار با استفاده از نرم افزار انسیس کمکین- پرو [23] استفاده می شود. از ماژول های تعادلی فازی و شیمیایی و ماژول سرعت شعله آرام برای محاسبه میزان آلایندگی، دمای آدیاباتیک شعله و همچنین سرعت شعله آرام استفاده می شود [24]. جهت حل معادلات جرم، گونه ها و انرژی، ترکیبی از ادغام زمان و ایتراسیون نیوتون از کد پرمیکس کمک گرفته می شود.

جدول (۱) مراحل مربوطه و واکنش های ابتدایی

شماره	واکنش مقدماتی	شماره	واکنش مقدماتی
R1	$H + O_2 \rightleftharpoons O + OH$	R12	$OH + CH_3 \rightleftharpoons CH_2(S) + H_2O$
R2	$O + H_2 \rightleftharpoons OH + H$	R13	$HO_2 + CH_3 \rightleftharpoons OH + CH_3O$
R3	$OH + H_2O_2 \rightleftharpoons HO_2 + H_2O$	R14	$HCO + H_2O \rightleftharpoons H + CO + H_2O$
R4	$OH + HO_2 \rightleftharpoons O_2 + H_2O$	R15	$HCO + O_2 \rightleftharpoons H_2O + CO$
R5	$H + O_2 + H_2O \rightleftharpoons H_2O + H_2$	R16	$OH + CH_4 \rightleftharpoons CH_3 + H_2O$
R6	$H + HO_2 \rightleftharpoons O_2 + H_2$	R17	$HCO + M \rightleftharpoons H + CO + M$
R7	$2OH \rightleftharpoons O + H_2$	R18	$H + NO + M \rightleftharpoons HNO + M$
R8	$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$	R19	$NH_2 + NO \rightleftharpoons NNH + OH$
R9	$H + CH_3(+M) \rightleftharpoons CH_4(+M)$	R20	$HNO + H \rightleftharpoons H_2 + NO$
R10	$O + CH_3 \rightleftharpoons H + CH_2O$	R21	$NH_2 + H \rightleftharpoons NH + H_2$
R11	$OH + CO \rightleftharpoons H + CO_2$	R22	$NH_2 + O \rightleftharpoons HNO + H$

یک سیلندر حاوی دی اکسیدکربن و دیگری حاوی متان برای ساخت ترکیبات مختلف گاز زیاله استفاده شده است. تمام گازها دارای خلوص حداقل ۹۹/۹۹٪ هستند. یک کمپرسور، هوای مورد نیاز را تامین می کند و یک تله آب برای رطوبت زدایی ذرات بخار آب موجود در هوا از آن استفاده شده است (شکل ۱).

۲-۱- اینترفرومتری

در سیستم تصویربرداری شلیرن (Schlieren) از یک منبع نور ۱۰۰۰ میلی وات لیزر سبز ($\lambda = 520$ نانومتر) استفاده می شود. برای ایجاد یک منبع نور نقطه ای، یک شیء میکروسکوپی با طول مخروطی ۶ میلی متر و یک سوراخ به قطر ۴ میکرومتر برای گسترش پرتو نور استفاده می شود. محفظه احتراق بعد از عدسی قرار می گیرد. یک دوربین با سرعت بالا (۱۰۰۰۰ فریم در ثانیه با وضوح 540×960) برای ضبط تصاویر شعله استفاده می شود که همچنین برای کنترل فوری روی صفحه نمایش نشان داده می شود (شکل ۱).

تداخل سنجی ماخ زندر به طور گسترده برای تجسم ضریب شکست محصولات احتراق بمنظور دستیابی به حداکثر دمای شعله و توزیع دمای آن استفاده می شود. اجزای اصلی روش ماخ زندر میکرولنز، دو تقسیم کننده پرتو، سه آینه، یک پین هول، یک دوربین، دو عدسی، یک کامپیوتر و مهمتر از همه لیزر هستند که همگی روی میز اپتیک قرار می گیرند (شکل ۲). یک منبع نور هلیوم-نئون (۵ میلی وات و $\lambda = 6328$) برای تولید پرتوهای لیزری استفاده می شود که از سوراخ پین هول و میکرولنز عبور می کند. پس از عبور از یک موازی ساز (قطر ۱۰ سانتی متر)، پرتو پخش شده به آینه ۵۰ درصد می رسد. نیمی از پرتو توسط ناحیه شعله مسدود می شود، در حالی که نیمی دیگر بدون تغییر در ضریب شکست آن محیط را طی می کند. متعاقباً، پرتوهای به هم می پیوندند. به دلیل اختلاف فازها بین دو پرتو، خطوط تیره و روشن روی آینه ظاهر می شوند و با استفاده از دوربین دیجیتال ۳۰ فریم بر ثانیه ضبط می شوند و بعداً به رایانه منتقل می شوند. مطالعات پیشین حاوی اطلاعات کامل تری در مورد تداخل سنجی ماخ زندر است [21,22].

بعد از اتمام محاسبات شعاع جبهه شعله، برای به دست آوردن مقادیر سرعت شعله آرام، لازم است داده‌های خام را تغییر داده و اثر نرخ کشیدگی را حذف کنیم. بنابراین، پس از محاسبه شعاع جبهه شعله و به دست آوردن مقادیر سرعت آرام شعله، داده‌های خام تغییر می‌کند تا تأثیر نرخ کشیدگی از نتایج محاسبه شده حذف شود. معادله (۵) برای اصلاح نتایج محاسبه شده سرعت شعله کشیده شده استفاده می‌شود [29].

$$S_b = S_b^0 - L_b \cdot \kappa \quad (5)$$

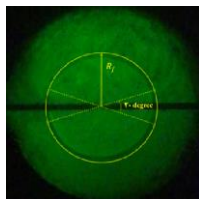
از سوی دیگر، در تکنیک غیرخطی، اصلاح با استفاده از معادله (۶) انجام می‌شود [30].

$$\left(\frac{S_b}{S_b^0}\right)^2 \ln\left(\frac{S_b}{S_b^0}\right) = -\frac{L_b \kappa}{S_b^0} \quad (6)$$

در اینجا، L_b طول مارکشتین است که یک مقدار ثابت حدوداً برابر با ضخامت شعله است و نمایانگر تأثیر ساختار شعله بر سرعت شعله است [31]. S_b سرعت شعله آرام کشیده شده را نشان می‌دهد و S_b^0 سرعت شعله آرام غیرکشیده شده می‌باشد. در این کار، از تکنیک غیرخطی برای کاهش سرعت گسترش شعله غیر کشیده شده استفاده شده است.

۳-۲- صحت سنجی

دقت و قابلیت اعتماد مدل سینتیک استفاده شده در پیش‌بینی سرعت سوزش شعله آرام آمونیاک/هوا در ترکیبات مختلف گاز زیاله، بررسی شده است. علاوه بر این، نتایج شبیه‌سازی حاصل از سه مکانیزم سینتیکی مجزا با داده‌های تجربی مربوطه از دیگر مطالعات [5,6] مقایسه شده‌اند. مکانیزم‌های سینتیکی استفاده شده شامل مکانیزم جی آر آی ۳ (شامل ۳۲۵ واکنش و ۵۳ گونه)، مکانیزم سن دیگو (شامل ۳۱۱ واکنش و ۶۸ گونه) و مکانیزم اکافور (شامل ۳۵۶ واکنش و ۵۹ گونه) می‌باشند. در شکل ۴، نتایج شبیه‌سازی و مقادیر تجربی برای نسبت‌های مختلف مولی متان در فشارها و دماهای ۱ اتمسفر و ۲۹۸ کلوین به ترتیب مقایسه شدند. نتایج نشان می‌دهند که پیش‌بینی‌های سرعت‌های سوزش آرام توسط مکانیزم اکافور با داده‌های تجربی بسیار تطابق خوبی دارند، در حالی که پیش‌بینی‌های تولید شده توسط مکانیزم سن دیگو و جی آر آی ۳ کمتر از مقادیر تجربی بودند. بنابراین، مکانیزم اکافور دقت بیشتری در تخمین سرعت سوختن آرام شعله نسبت به مکانیزم سن دیگو و جی آر آی ۳ دارد. در تحلیل‌ها و بحث‌های بعدی، از مکانیزم اکافور استفاده خواهد شد.



شکل ۳) نمایی جلو از شعله در حال انتشار

علاوه بر انجام آزمایشات، یک شبیه‌سازی یک بعدی از انسیس کمکین- پرو برای محاسبه سرعت شعله و غلظت گونه‌ها انجام می‌شود. برای شبیه‌سازی جزئیات پدیده‌های سوخت و ساز، از سه مکانیزم سینتیک شیمیایی معروف مکانیزم جی آر آی ۳ [5]، سن دیگو (شامل مکانیزم هیدروکربن مقدماتی و نیتروژن با مکانیزم فرعی) [25] و اکافور [6] استفاده می‌شود. به منظور اطمینان از استقلال از شبکه در این مطالعه حداقل ۱۰۰۰ نقاط شبکه در هر مورد استفاده شد در حالی که پارامترهای کنترل شبکه GRAD و CURV روی ۰/۰۲ تنظیم شده بود که تا فرض استقلال از شبکه با دقت قابل قبولی انجام شود [26]. برای افزایش دقت شبیه‌سازی، فرمولاسیون چند جزئی برای تعیین ضرایب انتشار گونه‌ها و شار استفاده شد. مکانیزم جی آر آی ۳ شامل ۳۲۵ واکنش و ۵۳ گونه می‌باشد. از طرفی دیگر، مکانیزم سن دیگو شامل ۳۱۱ واکنش و ۶۸ گونه و مکانیزم اکافور شامل ۳۵۶ واکنش و ۵۹ گونه می‌باشد. در جدول ۲، شماره مراحل مربوطه و واکنش‌های ابتدایی مربوط به مکانیزم اکافور آورده شده است.

۳-۱- مدل ریاضی

شعله در مرکز محفظه احتراق روشن می‌شود و به شکل کروی به سمت دیواره‌ها گسترش می‌یابد. برای محاسبه شعاع جبهه شعله بر اساس تصاویر گسترش شعله، همانطور که در شکل ۳ نشان داده شده می‌شود در هر لحظه یک دایره روی آن ساخته می‌شود. جهت جلوگیری از تأثیر الکترودها بر محاسبات، یک منطقه ۳۰ درجه در اطراف آن از داده‌های محاسباتی حذف می‌شود. اطلاعات مربوط به شعاع شعله نسبت به زمان برای محاسبه سرعت گسترش شعله (S_b) با استفاده از معادله (۱) استفاده شد [27].

$$S_b = \frac{dR_f}{dt} \quad (1)$$

R_f شعاع جبهه شعله در هر لحظه را نشان می‌دهد که در شکل ۴ نمایش داده شده است. معادله (۲) سرعت سوزش (S_u) را به سرعت آرام شعله آرام کشیده شده بیان می‌کند [27].

$$S_u = \frac{S_b}{\sigma} \quad (2)$$

که در آن $\sigma = \rho_u / \rho_b$ نسبت گسترش است و ρ_u و ρ_b به ترتیب چگالی گاز سوخته و گاز سوخته نشده می‌باشند.

ضریب کشیدگی یک شعله کروی (κ) می‌تواند با استفاده از معادله (۳) بیان شود.

$$\kappa = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \quad (3)$$

که در آن A مساحت سطح جبهه شعله است و می‌توان نرخ کشیدگی را با استفاده از معادله (۴) در هنگام بررسی گسترش کروی شعله محاسبه کرد [27].

$$\kappa = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} = \frac{1}{R_f^2} \frac{dR_f^2}{dt} = \frac{2}{R_f} \frac{dR_f}{dt} \quad (4)$$

[36] به پراکندگی نتایج ثبت شده در اندازه‌گیری های تکراری با شرایط عملیاتی مشابه مرتبط است. برای محاسبه عدم قطعیت تصادفی از سطح اطمینان ۹۵٪ استفاده شده است. در این مطالعه، بیشترین عدم قطعیت ۲۰/۱٪ مشاهده شد. عدم قطعیت برای آزمایش‌های که سرعت شعله آنها از ۹ سانتی متر بر ثانیه بیشتر می‌باشد کمتر از ۱۰ درصد ملاحظه شد در حالی که بیشتر آزمایش‌های انجام شده در این محدوده قرار گرفته‌اند.

مقادیر مخلوط جهت آزمایش در محفظه با توجه به فشارهای جزئی مورد نیاز گازهای جزء با استفاده از سنسور فشار سیلیکونی (با دقت ± 0.04 درصد مقیاس کامل) فراهم شده‌اند. تمامی نتایج ارائه شده در این مطالعه با بررسی عدم قطعیت مربوطه گزارش شده‌اند.

۴- نتایج و بحث

این مطالعه تحقیقاتی عمدتاً به بررسی تأثیر دمای فشار اولیه و اثر افزودن آمونیاک به مخلوط بر سرعت شعله آرام تمرکز دارد. محدوده تغییر مشخصه‌ی مورد بررسی در جدول ۱ ذکر شده است. که در آنها منظور از $\alpha = \frac{[NH_3]}{[NH_3] + [CH_4] + [CO_2]}$ و $\beta = \frac{[CH_4]}{[CH_4] + [CO_2]}$ بدین صورت می‌باشند.

۴-۱- مشاهده تصویر

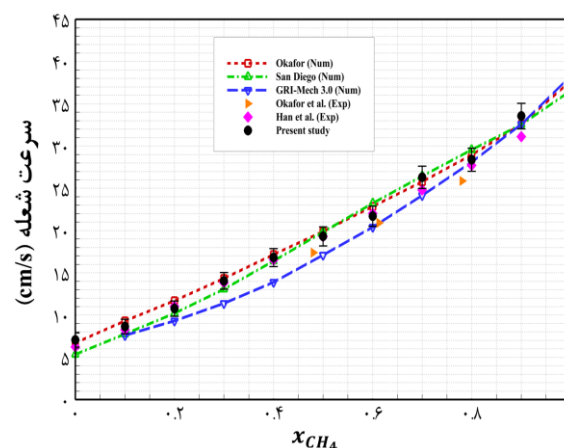
شکل ۵ تصاویر مستقیم از شعله آمونیاک/گاز زباله/هوا در شرایط مختلف را نشان می‌دهد. هیاکاو و گوتو [۳] معتقدند که ظاهر نارنجی رنگ شعله نتیجه‌ای از حضور رادیکال‌های NH_2 و ملکول‌های بخار آب می‌باشد [37]. با افزایش غلظت آمونیاک، سطح رادیکال‌های NH_2 نیز افزایش می‌یابد که باعث نارنجی‌تر شدن تصویر می‌شود.

۴-۲- مشخصات شعله گاز زباله/آمونیاک/هوا

افزایش S_L معمولاً ناشی از اثرات حرارتی، شیمیایی و انتقالی می‌باشد. در دیگر مطالعات می‌توان مشاهده نمود که افزایش S_L توسط اثر شیمیایی نسبت به دیگر اثرها غالب می‌باشد و درحالی‌که سرعت شعله آرام تحت تأثیر مثبت اثر حرارتی قرار می‌گیرد [38].

جدول ۲) محدوده تغییر مشخصه مورد بررسی

Case	ϕ	LFG Composition	ENH3	Pi (atm)	Ti (K)
(Base case)	۱	LFG 70	۰/۴	۱	۳۰۰
۱	۱	LFG 70	۰/۴ و ۰/۲، ۰	۱	۳۰۰
۲	۱	LFG 70	۰/۴ و ۱۰	۷، ۵	۳۰۰



شکل ۴) مقایسه نتایج بدست آمده از نتایج تجربی و مکانیزم های متفاوت

۳-۳- عدم قطعیت

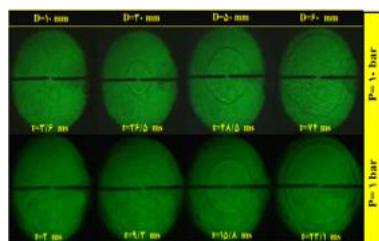
عدم قطعیت از ارکان اساسی در مطالعات تجربی می‌باشد. در محاسبه سرعت شعله آرام چندین منبع خطا وجود دارد [32,33]. اتلاف حرارت تشعشعی منبع اصلی عدم قطعیت می‌باشد. یو و همکاران [34] عدم قطعیت تشعشعی را مورد مطالعه قرار دادند. اثر تشعشع با کاهش سرعت شعله افزایش می‌یابد. از دیگر موارد منابع عدم قطعیت می‌توان به جداره محفظه اشاره نمود. قطر شعله مورد محاسبه حدود ۳۵ میلی‌متر می‌باشد در حالی که قطر جداره ۲۲۵ میلی‌متر می‌باشد. از اینرو عدم قطعیت مربوط به اثر دیواره محفظه قابل چشم پوشی می‌باشد. در شعاع‌های کمتر از ۱۰ میلی‌متر، تغییر شعاع نسبت به زمان بخاطر انرژی اشتعال خطی نمی‌باشد. بنابراین شعاع‌های کمتر از ۱۰ میلی‌متر در محاسبات وارد نمی‌شود [35].

اوکافور و همکاران [7]، علی رغم اینکه شعله گاه‌ها به سمت بالا کشیده می‌شود تأثیری بر نتایج ندارد. همچنین احتراق آمونیاک مقدار قابل توجهی آب تولید می‌کند که ممکن است درون محفظه میعان شوند. بنابراین این اتفاق ممکن است منجر به ابهام در تخلیه کامل محفظه بعد از هر آزمایش شود. در نتیجه بعد از هر آزمایش، محفظه با جریان هوا رطوبت زدایی می‌شود.

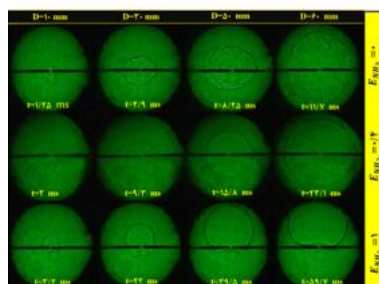
سنسورهای دما و فشار به ترتیب دارای دقت ۰/۵ درصد (در مقیاس کامل) با مقیاس کامل ۵ اتمسفر و ۰/۴ درجه سانتی گراد برای محدوده ۱۰۰ تا ۲۰۰ درجه می‌باشند. برای شرایط مختلف، عدم قطعیت‌ها محاسبه و با نتایج SL ارائه شد. برای دما عدم قطعیت با استفاده از رابطه ۷ محاسبه می‌شود:

$$u_N = \left[u_c^2 + \left(\sum_{i=1}^{N-1} u_i^2 \right) \right]^{1/2} \quad (7)$$

که u_c خطای ابزار و u_i عدم قطعیت مرتبه اول می‌باشد. برای تایید تکرار پذیری نتایج، هر آزمایش سه تا پنج بار اجرا شده است. سپس میانگینی از نتایج ارائه شده است. عدم قطعیت تصادفی یا آماری



(الف)



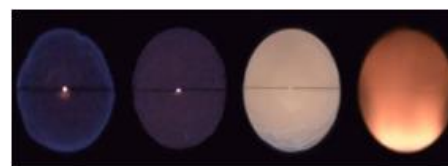
(ب)

شکل ۷) تصاویر شعله در حال انتشار: الف) فشارهای متفاوت، ب) درصد آمونیاک متفاوت

۴-۴- بررسی شعله تحت اثر فشار

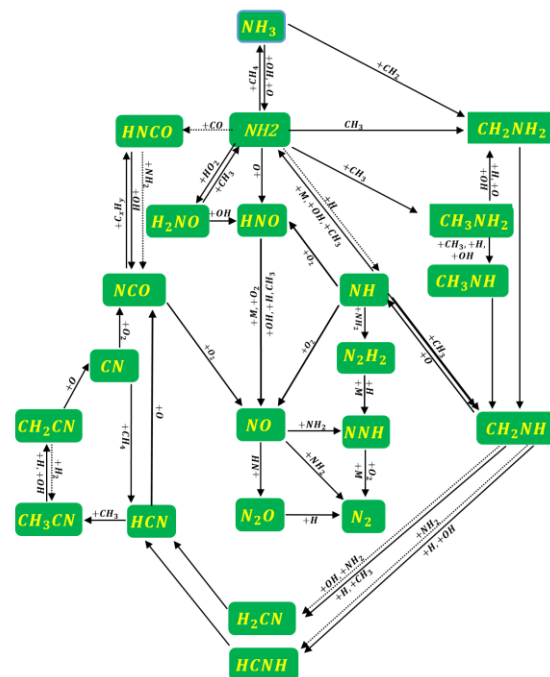
در بسیاری از کاربردهای صنعتی، احتراق در فشارهای بالا اتفاق می‌افتد. به همین دلیل، بررسی خواص سوخت در فشارهای بالاتر از فشار محیطی ضروری است.

تاریخچه فشار (P) درون محفظه احتراق در طی گسترش شعله در شکل ۷-الف برای نسبت هم ارزی واحد برای فشارهای مختلف نشان داده شده است. سطح جبهه شعله در فشار یک بار بسیار صاف می‌باشد در حالیکه وقتی در شرایط مشابه فشار اولیه محفظه به ۱۰ بار می‌رسد باعث ناپایداری جبهه شعله می‌شود [41]. در تصویر ۷-الف برای فشار ۱۰ بار می‌توان ملاحظه نمود که سطح جبهه شعله مقداری اعوجاج دارد. از اینرو شعله در فشارهای بالاتر ناپایدار می‌شود. در بررسی زمانی برابر می‌توان ملاحظه نمود که اندازه قطر شعله با افزایش فشار کمتر شده است. به عبارتی دیگر سرعت شعله کاهش یافته است. این اتفاق را از دو دیدگاه ترمودینامیک و سینتیکی مورد بررسی قرار می‌دهیم. قبل از بررسی دیدگاه ترمودینامیکی این اتفاق، تعریف دو پارامتر اصلی نفوذ (جرمی و حرارتی) و حرکت توده‌ای، حائز اهمیت می‌باشد. ضریب نفوذ حرارتی توسط رابطه ۸ تعریف می‌شود. نظریه چپمن-انسکوگ [42] به وابستگی ضریب نفوذ جرم به فشار و دما از طریق رابطه ۹ بیان می‌کند. در این معادله جرم مولکولی (گرم بر مول) با M، دمای مطلق (کلوین) با T مشخص می‌شود و قطر متوسط برخوردی با $\sigma_{12} = 0.5(\sigma_1 + \sigma_2)$ بیان می‌شوند. همانطور که در این معادلات نشان داده شده است، نفوذپذیری و فشار رابطه معکوس دارند. بنابراین، ضرایب نفوذ جرم و حرارت در هنگام افزایش فشار کاهش می‌یابند و به طور مستقیم بر سرعت شعله



$\alpha = 0$ $\alpha = 0.4$ $\alpha = 0.6$ $\alpha = 1$

شکل ۵) تصاویر مستقیم بدست آمده از شعله

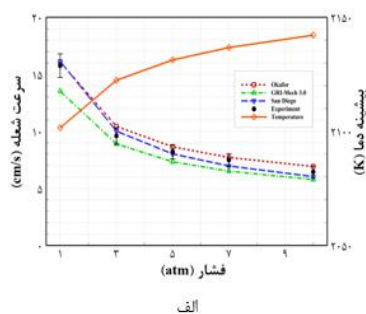


شکل ۶) دیاگرام مسیر واکنش‌ها در نسبت هم ارزی واحد [۶]

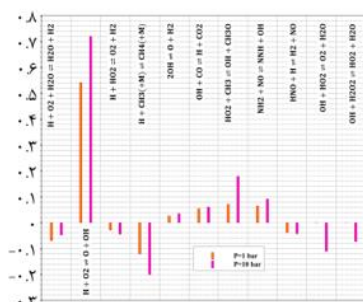
در این بخش، آلاینده‌ها و توجیه تغییرات آنها ناشی از سینتیک احتراق ترکیبات متان/آمونیاک و مخلوط متان/دی اکسید کربن [39,40] تشریح شده است. برای مطالعه نحوه تأثیر هوا بر آلاینده‌ها، سینتیک شیمیایی مخلوط تحت شرایط مختلف نسبت هم ارزی مورد بررسی قرار گرفته است (جدول ۱ را ببینید). شکل ۶ مسیرهای واکنش ترکیبات مختلف متان/آمونیاک را بر اساس مکانیزم پیشنهادی اکافور نشان می‌دهد. آنچه از دیاگرام اکافور استنتاج می‌شود این است که رادیکال‌های آمونیاک و آمین با رادیکال‌های متان و متیل تعامل چشمگیری که بر سرعت شعله آرام بتوانند تأثیر بگذارند، ندارند. به عبارتی دیگر، آنها با رادیکال‌های هیدروژن و اکسیژن بیشتر در ارتباط هستند. رادیکال‌های در دسترس بیشتر به معنی مصرف سوخت بیشتر و افزایش نرخ واکنش می‌باشد.

۴-۳- انتشار شعله در شرایط متفاوت

شعله‌های کروی مخلوط‌های آمونیاک/گاز زیاله/هوا در شرایط مختلف بر اساس جدول ۱ با استفاده از روش اینترفرومتری شلیرن بدست آمده است و در شکل ۷ نمایش داده شده است. هر تصویر در بخش مربوط به خود توضیح داده شده است. *



الف



3-

شکل ۹) الف) سرعت شعله و ب) آنالیز حساسیت سرعت شعله در شرایط فشاری متفاوت



از آنجایی که آمونیاک و ترکیبات آن به عنوان یک پله مقدماتی به سوی صنعت سوخت‌های بدون کربن در آینده پیشنهاد شده است، بسیار حائز اهمیت است که دیدی درباره دیگر آلاینده‌های اساسی مانند منواکسید کربن و دی اکسید کربن داشته باشیم. به همین ترتیب در بررسی آنها شاهد آن هستیم که با افزایش فشار، میزان منواکسید کربن کاهش می‌یابد و در طرف مقابل دی اکسید کربن تشدید می‌شود.



در فشارهای بالاتر (استخر رادیکالی پایین‌تر)، انتظار می‌رود که منو اکسید نیتروژن نسبت به منو اکسید کربن و دی اکسید کربن بیشتر تغییر کند از آنجاییکه واکنش‌پذیری آمونیاک بیشتر از دی اکسید کربن می‌باشد. همانطور که در شکل ۶ نشان داده شده است، با توجه به کاهش سطح استخر رادیکال ناشی از افزایش فشار، انتظار می‌رود که منو اکسید کربن به عنوان مهمترین آلاینده ظاهر شود و مسیر HNCO را تقویت کند. در این راستا، منو اکسید کربن توسط گونه‌های دیگر مصرف می‌شود که می‌تواند منجر به کاهش سطح منو اکسید کربن شود. در مقابل، شکل ۸-ب افزایش قابل توجهی در سطح دی اکسید کربن را نشان می‌دهد. همانطور که گفته شد، سطح استخر رادیکالی با افزایش فشار کاهش می‌یابد؛ بنابراین، دی اکسید کربن به سختی با متان یا آمونیاک واکنش می‌دهد تا بتواند رادیکال OH تولید کند. بنابراین، بیشتر آن به صورت دی اکسید کربن باقی می‌ماند.

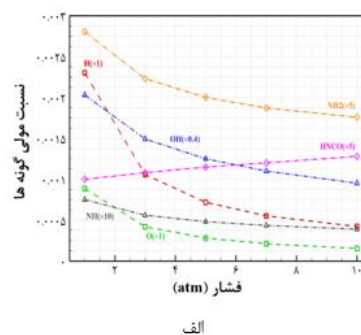
تأثیر می‌گذارند. به عبارتی سرعت شعله نشان دهنده ضریب نفوذ حرارتی و جرمی آن نیز می‌باشد. بنابراین، همانطور که فشار افزایش می‌یابد، سرعت شعله طبق معادلات ۷ و ۸ کاهش می‌یابد [43].

$$\alpha = \frac{k}{\rho_u C_p} = \frac{k R_u T_u}{P_u C_p} = f(k, R_u, C_p) \times \frac{T_u}{P_u} \quad (\Lambda)$$

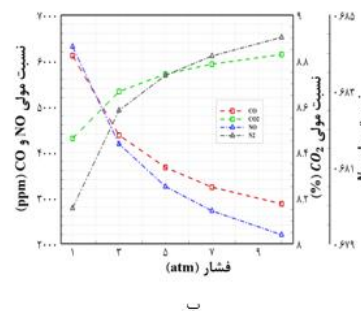
$$D = \frac{1.858 \times 10^{-3} \times T_u^{1.5} \times \sqrt{\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}}}{P_u \sigma_{12}^2 \Omega} \quad (9)$$

اگرچه افزایش فشار موجب افزایش نرخ واکنش می‌شود، اما دلیل عمده برای کاهش سرعت شعله آرام در مقابل افزایش فشار، مقدار بالای چگالی مخلوط نسوخته است. به طور فیزیکی، یک گاز متراکم در بالادست وجود دارد که شعله از آن عبور کرده و گرم می‌شود.

از دیدگاه سینتیک، واکنش‌های شیمیایی با افزایش فشار افزایش می‌یابند. با بررسی دقیق شکل ۸-الف، نتیجه می‌گیریم که فشار به طور قابل توجهی بر سطح استخر رادیکالی (فشار بالا «رادیکال کم) تأثیر می‌گذارد. بنابراین انتظار می‌رود که کاهش استخر رادیکالی موجب کاهش سرعت شعله نیز بشود. همچنین، همانطور که در شکل ۸-ب نشان داده شده است، با افزایش فشار، تشکیل منواکسید نیتروژن کاهش می‌یابد. اصل لوشاتلیه می‌گوید که تعادل به سمت تعدیل تغییر پیش می‌رود [44]. بنابراین، با افزایش فشار، سیستم به سمت کاهش تعداد مول حرکت می‌کند. کاهش تشکیل منواکسید نیتروژن بر اساس واکنش زیر مورد انتظار است.



الف



5

شکل ۸) نسبت‌های مولی بدست آمده در شرایط فشاری متفاوت: الف) رادیکال‌ها، ب) گونه‌ها

آمونیاک دارد که علت این امر ناشی از نقش آن در تولید رادیکال-های H و OH می‌باشد.

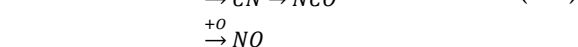
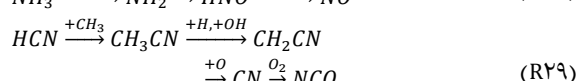
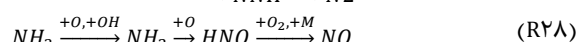
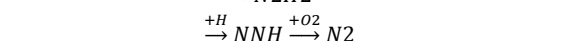
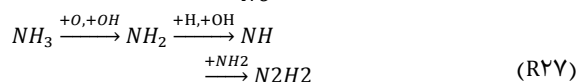
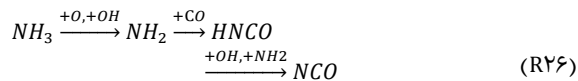
با توجه به مسیرهای واکنشی که در شکل ۷ نشان داده شده‌اند، افزایش غلظت آمونیاک منجر به کاهش غلظت متان در مخلوط می‌شود. با توجه به اینکه متان تنها منبع کربن‌دار ترکیب می‌باشد، کاهش غلظت آن منجر به کاهش دی‌اکسید کربن تولیدی می‌شود (شکل ۱۰-ب).



زمانی که غلظت آمونیاک بالا است، غلظت دی‌اکسید کربن کاهش می‌یابد. به عبارت دیگر، کاهش دی‌اکسید کربن منجر به تولید کمتری از دی‌اکسید کربن می‌شود.

می‌توان حدس زد که مسیر سیانید مسیری اصلی تا قبل از نقطه‌ی عطف ($0.4 < \alpha$) می‌باشد، در حالی که مسیرهای دیگر به جز واکنش ۱۴ کمک به تشکیل منو اکسید نیتروژن می‌کنند. این مسئله می‌تواند اینگونه توجیه شود که افزودن آمونیاک به ترکیب باعث کاهش استخر رادیکالی (O, OH, H) شود که دلیل آن می‌تواند ضعیف‌تر بودن پیوندهای شیمیایی ملکول متان نسبت به ملکول آمونیاک باشد (شکل ۱۰-الف).

از شکل ۱۰-ب مشخص است که افزایش غلظت آمونیاک در مخلوط سوختی (تا $0.4 < \alpha$) در ابتدا منجر به افزایش مقدار منو اکسید نیتروژن می‌شود و سپس پس از آن کاهش می‌یابد. چهار مسیری که نقش حیاتی در تولید منو اکسید نیتروژن دارند عبارتند از:



با توجه به شکل ۱۱-الف، می‌توان فهمید که در حدود $\alpha = 0.4$ یک نقطه‌ی عطف وجود دارد. این روند تغییرات دما با استفاده از مکانیسم‌های تغییر مسیر از مسیر نیتروژن به مسیر منو اکسید نیتروژن توجیه می‌شود. با این حال، پس از نقطه‌ی عطف، مسیر واکنش برای تولید نیتروژن شروع به غلبه کردن می‌کند. همانطور که در شکل ۱۱-الف نشان داده شده است، از طریق افزایش غلظت آمونیاک در مخلوط، دمای بیشینه شعله کاهش می‌یابد. از آنجاییکه انتالپی سوخت آمونیاک از گاز زیاده کمتر می‌باشد انرژی آزادسازی حرارتی کمتری تولید می‌کند. بنابراین، بیشتر محصولات منجر به دمای بیشینه شعله کمتری می‌شوند.

همانطور که در شکل ۹-الف نشان داده می‌شود، دمای حداکثر شعله با افزایش فشار به دلیل تعامل گونه‌ها افزایش می‌یابد. انتظار می‌رود با افزایش فشار، غلظت بیشتر شود که باعث ایجاد اثر شیمیایی شود. در نتیجه، با افزایش فشار دما افزایش می‌یابد. نوار خطای نشان داده در شکل ۸-ب بیانگر میزان عدم قطعیت مربوط به سرعت شعله آرام می‌باشد. با افزایش فشار سرعت شعله به صورت غیرخطی کاهش می‌یابد.

آنالیز حساسیت روشی مناسب برای درک سینتیک انتشار شعله می‌باشد. ضرایب آنالیز حساسیت نرمالیزه شده برای مخلوط بیوگاز/آمونیاک در فشارهای ۱ و ۱۰ بار برای سرعت شعله آمونیاک/گاز زیاله در شکل ۹-ب گزارش شده است. ضریب آنالیز حساسیت بیانگر چگونگی تغییرات سرعت شعله در واکنش‌های i ام می‌باشد (معادله ۱۰) [26].

$$SF_i = \frac{\alpha_i \partial s_i}{s_i \partial \alpha_i} \quad (10)$$

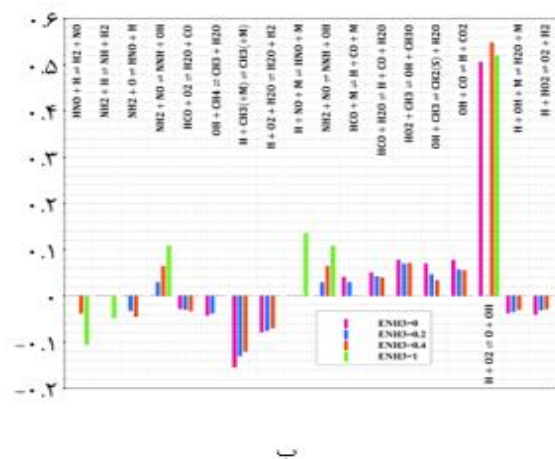
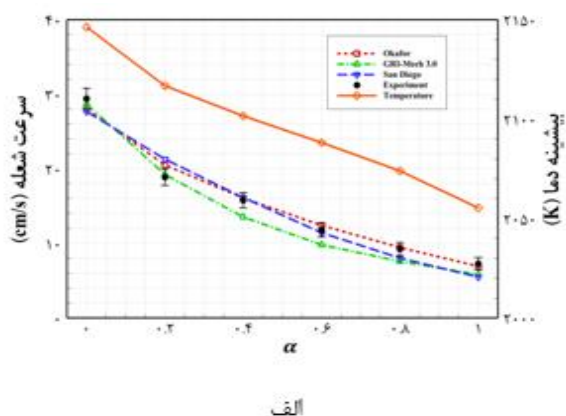
در رابطه بالا SF ضریب حساسیت برای واکنش i ام می‌باشد. α_i ثابت نرخ برای واکنش i و s_i سرعت شعله می‌باشد. ضریب حساسیت مثبت بیانگر این است که واکنش تأثیر مثبت بر شعله دارد در حالی که مقدار منفی نشان دهنده عکس آن می‌باشد.

در بررسی شکل ۹-ب می‌توان دریافت که تأثیر واکنش‌های ختم شونده (واکنش‌های ۳، ۴ و ۹) با افزایش فشار اولیه افزایش می‌یابد. از طرفی دیگر، افزایش این واکنش‌ها باعث کاهش استخر رادیکالی می‌شود که منجر به کاهش سرعت شعله می‌شود.

۴-۵- بررسی شعله تحت اثر ترکیبات متفاوت

تصویر برداری شلیرن برای شعله آمونیاک/گاز زیاله/هوا در ترکیب‌های مختلف سوخت انجام شده است و نتایج در شکل ۷-ب نشان داده شده است. از مقایسه تصاویر بدست آمده در شکل ۷-ب می‌توان دریافت که با افزایش آمونیاک اثر نیروی بویانسی غالب می‌شود و شعله به سمت بالا حرکت می‌کند. همچنین زمان لازم برای رسیدن به شعاع خاصی با کاهش غلظت آمونیاک در مخلوط کاهش یافته است، به عبارت دیگر، سرعت انتشار شعله با کاهش غلظت آمونیاک افزایش یافته است.

این اتفاق از دو دیدگاه ترمودینامیکی و سینتیکی قابل بررسی می‌باشد. در بررسی دیدگاه ترمودینامیکی افزایش سرعت شعله با کاهش غلظت آمونیاک را می‌توان اینگونه توجیه نمود که کاهش غلظت آمونیاک منجر به کاهش دمای شعله می‌شود، بنابراین منجر به کاهش نرخ انتشار شعله یا سرعت انتشار شعله آرام می‌شود. از طرفی دیگر، در بررسی دیدگاه سینتیکی، واکنش‌ها و رادیکال‌ها مورد توجه قرار می‌گیرند. افزودن آمونیاک منجر به کاهش سطح استخر رادیکالی می‌شود (شکل ۱۰-الف). به عبارت دیگر، افزایش آمونیاک باعث کاهش سرعت شعله می‌شود. واکنش شماره ۵ نقش بسیار مهمی در بیشتر ترکیبات حاوی



شکل ۱۱ (الف) سرعت شعله و (ب) آنالیز حساسیت سرعت شعله در شرایط فشاری متفاوت

چیدمان سوراخ‌ها تأثیر فراوانی در نوع تغییر شکل خواهد داشت. با افزایش تعداد سوراخ‌ها در هر ردیف نیروی آغازین لهیدگی کاهش می‌یابد. افزایش قطر سوراخ‌ها نیز در کاهش نیروی آغازین لهیدگی موثر می‌باشد.

با تغییر تعداد و اندازه قطر سوراخ و نیز نوع چیدمان آن، میزان جذب انرژی و نسبت انرژی به وزن تغییر می‌کند.

از بین نمونه‌های بهینه حاصل از طراحی آزمایش، نمونه C3 به عنوان بهترین هندسه انتخاب گردید که در آن چیدمان سوراخ‌ها طرح B با تعداد ۳ ردیف سوراخ، تعداد ۸ سوراخ در هر ردیف، قطر سوراخ کوچک ۵ میلی‌متر و ضریب قطر ۱/۲ (قطر بزرگ ۶ میلی‌متر) می‌باشد.

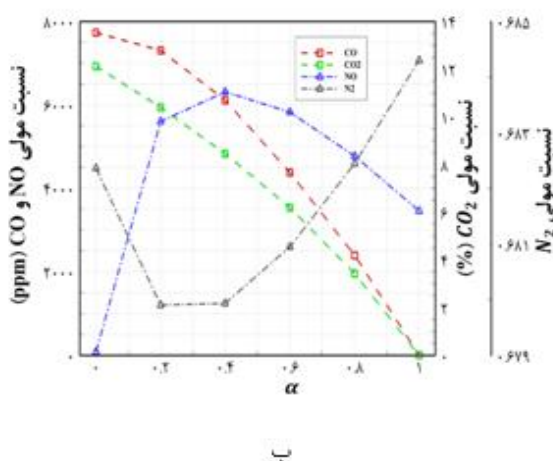
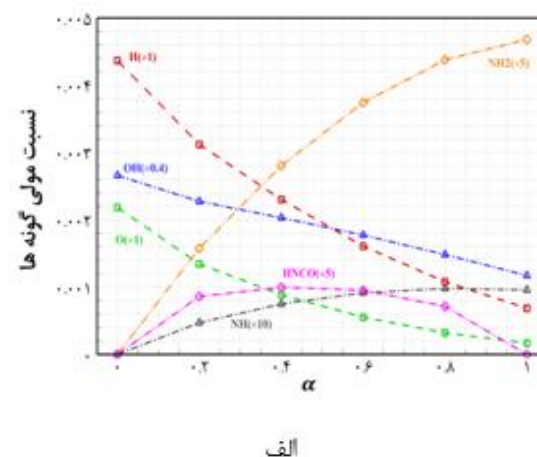
تأییدیه اخلاقی: نویسندگان در تهیه و تنظیم این مقاله رعایت کامل اصول اخلاقی را مدنظر قرار داده‌اند.

تعارض منافع: تمامی مطالب مذکور توسط نویسندگان انجام شده و هیچ فرد یا نهادی در تهیه آن نقش نداشته است.

منابع مالی: تمامی منابع مالی این تحقیق توسط نویسندگان مقاله تأمین شده است.

با توجه به شکل ۱۱-ب می‌توان ملاحظه نمود که با افزایش آمونیاک، واکنش‌های نیتروژنی مانند واکنش‌های ۱۸ و ۱۹ ضریب آنالیز حساسیت سرعت بیشتری نسبت به واکنش‌های حاوی کربن مانند واکنش‌های ۱۱ و ۱۲ دارند. مطابق با این موضوع، واکنش‌هایی مانند واکنش‌های ۵ و ۹ در غلظت‌های پایین آمونیاک پیامدهای مخرب قابل توجهی دارند. همچنین، واکنش‌های ۲۰ و ۲۱ نیز در ضرایب مولی بالای آمونیاک نقش مهم تری را ایفا می‌کنند.

بیشتر مواقع، واکنش‌هایی که ضریب حساسیت مثبت دارند، یک رادیکال فعال (H، O یا OH) را مصرف می‌کنند و رادیکال فعال دیگری را تشکیل می‌دهند، در حالی که واکنش‌هایی که ضریب حساسیت منفی دارند، رادیکال‌های فعال را مصرف می‌کنند تا واسطه‌های پایدار را تولید کنند.



شکل ۱۰ (الف) رادیکال‌ها، (ب) گونه‌ها نسبت‌های مولی بدست آمده در شرایط درصد آمونیاک متفاوت: (الف) رادیکال‌ها، (ب) گونه‌ها

- 15- Galmiche B, Halter F, Foucher F, Dagaut P. Effects of dilution on laminar burning velocity of premixed methane/air flames. *Energy & Fuels*. 2011 Mar 17;25(3):948-54.
- 16- Halter F, Foucher F, Landry L, Mounaïm-Rousselle C. Effect of dilution by nitrogen and/or carbon dioxide on methane and iso-octane air flames. *Combustion Science and Technology*. 2009 Jun 4;181(6):813-27.
- 17- Kiani M, Houshfar E, Ashjaee M. An experimental and numerical study on the combustion and flame characteristics of hydrogen in intersecting slot burners. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2018 Feb 1;43(5):3034-49.
- 18- Kiani M, Houshfar E, Ashjaee M. Experimental investigations on the flame structure and temperature field of landfill gas in impinging slot burners. *Energy*. 2019 Mar 1;170:507-20.
- 19- Wang L, Liu Z, Chen S, Zheng C, Li J. Physical and chemical effects of CO₂ and H₂O additives on counterflow diffusion flame burning methane. *Energy & fuels*. 2013 Dec 19;27(12):7602-11.
- 20- Hu E, Jiang X, Huang Z, Iida N. Numerical study on the effects of diluents on the laminar burning velocity of methane-air mixtures. *Energy & fuels*. 2012 Jul 19;26(7):4242-52.
- 21- Hauf W, Grigull U. Optical methods in heat transfer. In *Advances in heat transfer* 1970 Jan 1 (Vol. 6, pp. 133-366). Elsevier.
- 22- Flack RD. Mach-Zehnder interferometer errors resulting from test section misalignment. *Applied Optics*. 1978 Apr 1;17(7):985-7.
- 23- Chemkin-Pro AN. Release 17.0 (Chemkin-Pro 15151) ANSYS, Inc. (2016-01-11);14.
- 24- Ansys Inc. Ansys Chemkin-Pro. Chemistry Simulation Software 2023.
- 25- Bardolf R, Winter F. Comparison of chemical kinetic mechanisms for combustion simulation of treated biogas. *The Holistic Approach to Environment*. 2014 Jun 29;4(2):65-9.
- 26- Kohansal M, Kiani M, Masoumi S, Nourinejad S, Ashjaee M, Houshfar E. Experimental and numerical investigation of NH₃/CH₄ mixture combustion properties under elevated initial pressure and temperature. *Energy & Fuels*. 2023 Jul 6;37(14):10681-96.
- 27- Askari MH, Ashjaee M. Experimental measurement of laminar burning velocity and flammability limits of landfill gas at atmospheric and elevated pressures. *Energy & Fuels*. 2017 Mar 16;31(3):3196-205.
- 28- Dowdy DR, Smith DB, Taylor SC, Williams A. The use of expanding spherical flames to determine burning velocities and stretch effects in hydrogen/air mixtures. In *Symposium (International) on Combustion* 1991 Jan 1 (Vol. 23, No. 1, pp. 325-332). Elsevier.
- 29- Matalon M, Matkowsky BJ. Flames as gasdynamic discontinuities. *Journal of Fluid Mechanics*. 1982 Nov;124:239-59.
- 30- Lhuillier C, Brequigny P, Lamoureux N, Contino F, Mounaïm-Rousselle C. Experimental investigation on laminar burning velocities of ammonia/hydrogen/air mixtures at elevated temperatures. *Fuel*. 2020 Mar 1;263:116653.
- 1- Valera-Medina AX, Owen-Jones H, David M, Wif BP. "Ammonia for Power" progress in energy and combustion science.
- 2- Kobayashi H, Hayakawa A, Somarathne KK, Okafor EC. Science and technology of ammonia combustion. *Proceedings of the combustion institute*. 2019 Jan 1;37(1):109-33.
- 3- Hayakawa A, Goto T, Mimoto R, Arakawa Y, Kudo T, Kobayashi H. Laminar burning velocity and Markstein length of ammonia/air premixed flames at various pressures. *Fuel*. 2015 Nov 1;159:98-106.
- 4- Mei B, Zhang X, Ma S, Cui M, Guo H, Cao Z, Li Y. Experimental and kinetic modeling investigation on the laminar flame propagation of ammonia under oxygen enrichment and elevated pressure conditions. *Combustion and Flame*. 2019 Dec 1;210:236-46.
- 5- 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. *Combustion and Flame*. 2019 Aug 1;206:214-26.
- 6- Okafor EC, Naito Y, Colson S, Ichikawa A, Kudo T, Hayakawa A, Kobayashi H. Experimental and numerical study of the laminar burning velocity of CH₄-NH₃-air premixed flames. *Combustion and flame*. 2018 Jan 1;187:185-98.
- 7- Okafor EC, Naito Y, Colson S, Ichikawa A, Kudo T, Hayakawa A, Kobayashi H. Measurement and modelling of the laminar burning velocity of methane-ammonia-air flames at high pressures using a reduced reaction mechanism. *Combustion and Flame*. 2019 Jun 1;204:162-75.
- 8- Cardona CA, Amell AA. Laminar burning velocity and interchangeability analysis of biogas/C₃H₈/H₂ with normal and oxygen-enriched air. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2013 Jun 27;38(19):7994-8001.
- 9- Beeckmann J, Cai L, Pitsch H. Experimental investigation of the laminar burning velocities of methanol, ethanol, n-propanol, and n-butanol at high pressure. *Fuel*. 2014 Jan 30;117:340-50.
- 10- Al-Hamamre Z, Yamin J. The effect of hydrogen addition on premixed laminar acetylene-hydrogen-air and ethanol-hydrogen-air flames. *International journal of hydrogen energy*. 2013 Jun 18;38(18):7499-509.
- 11- He Y, Wang Z, Yang L, Whiddon R, Li Z, Zhou J, Cen K. Investigation of laminar flame speeds of typical syngas using laser based Bunsen method and kinetic simulation. *Fuel*. 2012 May 1;95:206-13.
- 12- Hinton N, Stone R. Laminar burning velocity measurements of methane and carbon dioxide mixtures (biogas) over wide ranging temperatures and pressures. *Fuel*. 2014 Jan 15;116:743-50.
- 13- Dai W, Qin C, Chen Z, Tong C, Liu P. Experimental studies of flame stability limits of biogas flame. *Energy conversion and management*. 2012 Nov 1;63:157-61.
- 14- Zhang C, Shen X, Wen JX, Xiu G. The behavior of methane/hydrogen/air premixed flame in a closed channel with inhibition. *Fuel*. 2020 Apr 1;265:116810.

- 31- Kobayashi H, Tamura T, Maruta K, Niioka T, Williams FA. Burning velocity of turbulent premixed flames in a high-pressure environment. In Symposium (international) on combustion 1996 Jan 1 (Vol. 26, No. 1, pp. 389-396). Elsevier.
- 32- Konnov AA, Mohammad A, Kishore VR, Kim NI, Prathap C, Kumar S. A comprehensive review of measurements and data analysis of laminar burning velocities for various fuel+ air mixtures. Progress in Energy and Combustion Science. 2018 Sep 1;68:197-267.
- 33- Chen Z. On the accuracy of laminar flame speeds measured from outwardly propagating spherical flames: Methane/air at normal temperature and pressure. Combustion and Flame. 2015 Jun 1;162(6):2442-53.
- 34- Yu H, Han W, Santner J, Gou X, Sohn CH, Ju Y, Chen Z. Radiation-induced uncertainty in laminar flame speed measured from propagating spherical flames. Combustion and flame. 2014 Nov 1;161(11):2815-24.
- 35- Burke MP, Chen Z, Ju Y, Dryer FL. Effect of cylindrical confinement on the determination of laminar flame speeds using outwardly propagating flames. Combustion and Flame. 2009 Apr 1;156(4):771-9.
- 36- Ronney PD, Wachman HY. Effect of gravity on laminar premixed gas combustion I: Flammability limits and burning velocities. Combustion and Flame. 1985 Nov 1;62(2):107-19.
- 37- Kelley AP, Law CK. Nonlinear effects in the extraction of laminar flame speeds from expanding spherical flames. Combustion and Flame. 2009 Sep 1;156(9):1844-51.
- 38- Xiao H, Valera-Medina A, Marsh R, Bowen PJ. Numerical study assessing various ammonia/methane reaction models for use under gas turbine conditions. Fuel. 2017 May 15;196:344-51.
- 39- Iliuta I, Tahoces R, Patience GS, Riffart S, Luck F. Chemical-looping combustion process: Kinetics and mathematical modeling. AIChE journal. 2010 Apr;56(4):1063-79.
- 40- Sabia P, Sorrentino G, Chinnici A, Cavaliere A, Ragucci R. Dynamic behaviors in methane MILD and oxy-fuel combustion. Chemical effect of CO₂. Energy & Fuels. 2015 Mar 19;29(3):1978-86.
- 41- Loo CE, Tame N, Penny GC. Effect of iron ores and sintering conditions on flame front properties. ISIJ international. 2012;52(6):967-76.
- 42- Cussler EL. Diffusion: mass transfer in fluid systems. Cambridge university press; 2009 Jan 15.
- 43- Cussler EL. Diffusion: mass transfer in fluid systems. Cambridge university press; 2009 Jan 15.
- 44- Bellamy DJ, Clarke PH. Application of the Second Law of Thermodynamics and Le Chatelier's Principle to the Developing Ecosystem. Nature. 1968 Jun 22;218(5147):1180-.