

Numerical study of flammability limits of premixed combustion of ammonia-methane mixture in a porous media burner

Mehdi Sepahvand, Seyed Abdolmehdi Hashemi*, Ali Arefmanesh

Department of Mechanical Engineering, University of Kashan, Kashan, Iran

ABSTRACT

This study numerically examines how equivalence ratio, inlet velocity, and ammonia-to-methane ratio in fuel impact flammability limits and flame temperature distribution in an ammonia-methane mixture within a porous burner. The research employed the finite volume method in Fluent 22 software with a chemical kinetic model featuring 69 species and 389 reactions. Furthermore, as the equivalence ratio increases from 0.7 to 1, the minimum inlet velocity for the lower flammability limit rises by 57% (from 0.1 to 0.163 m/s), and the maximum inlet velocity for the upper flammability limit rises by 63% (from 0.14 to 0.244 m/s). For a fixed equivalence ratio, increasing ammonia percentage lowers peak gas and solid temperatures. Additionally, the widest ammonia range occurs at an equivalence ratio of 1 (10% to 100%), whereas at an equivalence ratio of 1.4, the range narrows to 10%–30%.

KEYWORDS

Porous burner, Ammonia fuel, Flame stability, premixed combustion, equivalence ratio.

1. Introduction

Greenhouse gases, such as carbon dioxide, alone account for approximately a 30% rise in global warming [1]. To mitigate these emissions, researchers have explored alternative energy sources. In this regard, ammonia has emerged as an attractive alternative fuel for combustion, containing 17.8% hydrogen [2]. Compared to other hydrocarbon fuels, ammonia exhibits lower reactivity, higher ignition delay, slower flame speed, and a narrower flammability range. To address these challenges, extensive research has been conducted by scientists. So far, limited studies have been carried out on ammonia fuel combustion in porous media burners, both experimentally and numerically, which are reviewed in the following sections. Berkman et al. [3] investigated the combustion of pure ammonia in a porous media burner and observed maximum NO concentrations at an equivalence ratio of 0.9. Wang et al. [4] examined the stability of ammonia-methane combustion in a double-layered porous media under fuel-lean conditions. The results showed that burner

0.5. Rocha et al. [5] studied the combustion of ammonia-methane-air and ammonia-hydrogen-air mixtures in a porous media burner using experimental and chemical kinetic approaches. They analyzed NO_x, CO, and unburned ammonia emissions. Hashemi et al. [6] experimentally investigated NO_x emissions in ammonia-methane fuel combustion within porous media. The results indicated that increasing the ammonia fraction reduced flame stability. Additionally, NO concentrations increased with ammonia fractions up to 50%, after which they declined. Increasing ammonia fractions also led to a reduction in CO emissions. Most studies conducted on ammonia combustion, either numerically or experimentally, have primarily focused on the chemical kinetic properties, such as laminar flame speed and ignition delay time in ammonia flames. Therefore, this research aims to enhance combustion parameters by employing a porous burner for the simultaneous combustion of ammonia-methane fuel mixtures using a numerical approach.

* Corresponding Author: Email: Hashemi@kashanu.ac.ir

stability was achieved even at an equivalence ratio of

ACCEPTED MANUSCRIPT

2. Methodology

To investigate and numerically simulate the flame stability of ammonia-methane combustion, the burner studied by Rocha et al. [5] was utilized. As illustrated in Figure 1, this burner consists of a dual-layer porous medium. The first porous layer is made of alumina ceramic with a pore density of 40 PPI, a diameter of 70 mm, and a length of 40 mm. The second porous layer is made of zirconia with a pore density of 10 PPI, a diameter of 70 mm, and a length of 40 mm. The properties of the porous matrices, as referenced from the study by Katapan et al. [7], are detailed in Table 1. It should be noted that the properties of zirconia, due to its complex manufacturing process, are a combination of several different materials. A comprehensive description of its properties is provided in the study by Katapan et al. [7].

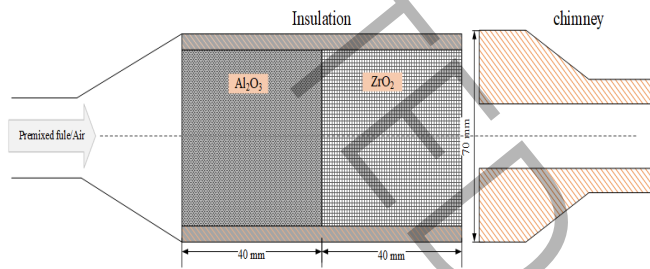


Figure 1. Schematic of the combustion chamber under study [5]

Table 1. Properties of porous matrices

Parameter	Unit	Zirconia	Alumina
Specific Heat Capacity (C_p)	J/kg·K	1200	3987
Density (ρ)	kg/m ³	4500	3750
Thermal Conductivity at 20°C	W/m·K	10-15	20-30
Thermal Conductivity at 1000°C	W/m·K	2-3	5-6
Porosity	-	0.8	0.8

The governing equations for this problem, including the conservation equations for mass, momentum, energy of the gas and solid phases, species conservation, and radiation within the porous medium, are solved numerically using the finite volume method and the SIMPLE algorithm in Fluent 22 software. The flow regime within the porous medium is considered steady-state and laminar, with appropriate assumptions such as the non-equilibrium condition between the gas and solid phases. In this study, the chemical reaction mechanism proposed by Xu et al. [8], comprising 69 species and 389 reactions, is employed to simulate the combustion of ammonia-methane with air. Additionally, pre-built libraries in CHEMKIN software are used to evaluate thermophysical and transport properties.

3. Result and discussion

This section presents and interprets the results of investigations into the influence of equivalence ratio, inlet velocity, and variations in ammonia fuel percentage on the temperature distribution of gas and solid phases, as well as the stability and flammability limits of the ammonia-methane fuel mixture.

This section investigates the effect of the inlet velocity of the fuel-air mixture, or in other words, the thermal power of the porous burner, as well as the equivalence ratio, on the flammability limits of the ammonia-methane fuel mixture. The study covers an equivalence ratio range from 0.7 to 1.2 and an ammonia fuel percentage of 80%. Figure 2 shows the lower and upper flammability limits for the minimum and maximum inlet velocities of the burner as a function of the equivalence ratio. The results indicate that as the equivalence ratio increases towards the stoichiometric region, both the minimum and maximum inlet velocities required to prevent flame blowoff and flashback increase. As observed, with an increase in the equivalence ratio from 0.7 to 1, the minimum inlet velocity for the lower flammability limit increases from 0.1 to 0.163 m/s, which represents a 63% increase. Similarly, the maximum inlet velocity for the upper flammability limit increases from 0.14 to 0.244 m/s (a 57% increase) with the rise in the equivalence ratio from 0.7 to 1. An important observation from Figure 2 is the greater dependence of flame flashback on the equivalence ratio, while the occurrence of flame blowoff does not change significantly beyond the stoichiometric region as the equivalence ratio increases.

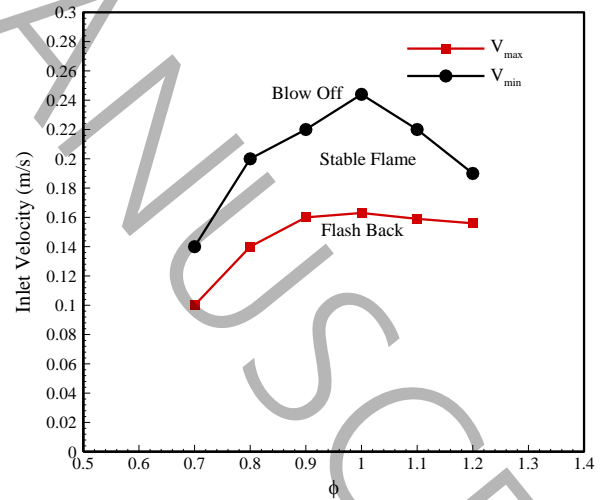


Figure 2. Upper and lower flammability limits of the flame at different inlet velocities and equivalence ratios

This section examines the effect of varying the ammonia percentage in the input fuel mixture within the range of 10% to 100%, as well as the impact of changing the equivalence ratio from 0.7 to 1.4, on the maximum temperatures of the gas phase and the

location of the flame zone. As shown in the graph in Figure 3 for the maximum gas-phase temperature, for a fixed equivalence ratio, the maximum gas-phase temperature decreases as the percentage of ammonia in the fuel mixture increases. This is due to the higher reaction rate (increased combustion reaction) of methane fuel compared to ammonia fuel. On the other hand, it can be observed that with an increase in the equivalence ratio up to 1, the maximum gas-phase temperature increases. When the equivalence ratio equals 1, the range of ammonia fuel usage reaches its maximum value. From the maximum temperature plot for the gas phase, it can be concluded that increasing the ammonia percentage in the input fuel mixture decreases flame stability. Additionally, the flammability limits of the burner can be controlled by adjusting the ammonia fuel percentage and the equivalence ratio.

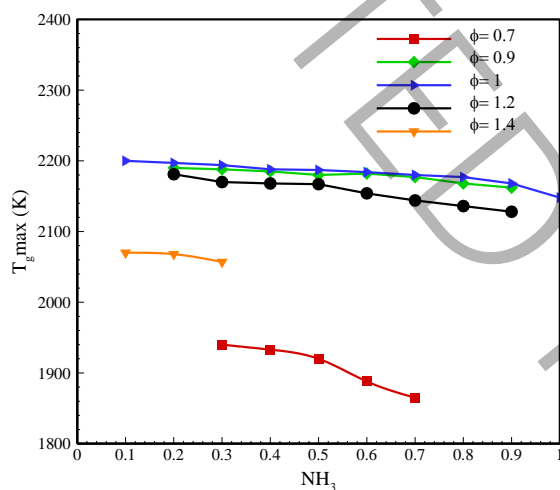


Figure 3. Diagram of maximum gas phase temperature in ammonia fuel percentage and different equivalence ratio

4. Conclusions

In this study, numerical simulation of premixed combustion of ammonia-methane fuel in a porous medium was performed using Fluent software. The goal was to investigate the effects of equivalence ratio, inlet velocity, and simultaneous changes in ammonia fuel percentage and equivalence ratio on flame performance parameters, including gas and solid-phase temperatures, flame zone position, and the flame stability limits of the burner. For validation, the chemical kinetics of Zhu et al. with 69 species and 389 reactions were compared with experimental results of Rocha et al., showing acceptable agreement in the gas and solid-phase temperature distribution charts. The key findings are summarized as follows:

As the equivalence ratio increases from 0.7 to 1, the minimum inlet velocity for the lower flame stability limit rises from 0.1 m/s to 0.163 m/s. Similarly, as the equivalence ratio increases from 0.7 to 1, the maximum inlet velocity for the upper flame stability limit

increases from 0.14 m/s to 0.244 m/s. Ultimately, the widest range of flame stability limits is observed within the equivalence ratio range of 0.9–1. At a constant equivalence ratio, increasing the percentage of ammonia in the fuel mixture leads to a reduction in the peak gas-phase temperature. This is because a higher ammonia content decreases the fuel reaction rate, resulting in a lower peak flame temperature. Increasing the percentage of ammonia in the fuel reduces the flame stability limits, as it decreases the burning velocity and reaction rate of the fuel. However, the flame stability limits can be controlled by adjusting the ammonia percentage and the equivalence ratio.

5. References

- [1] W. S. Chai, Y. Bao, P. Jin, G. Tang, L. Zhou, A review on ammonia, ammonia-hydrogen and ammonia-methane fuels, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 147 (2021) 111254.
- [2] A. Yapicioglu, I. Dincer, A review on clean ammonia as a potential fuel for power generators, *Renewable and sustainable energy reviews*, 103 (2019) 96-108.
- [3] C. Brackmann, V. A. Alekseev, B. Zhou, E. Nordström, P. E. Bengtsson, Z. Li, M. Aldén, A. A. Konnov, Structure of premixed ammonia + air flames at atmospheric pressure: Laser diagnostics and kinetic modeling, *Combustion and Flame*, 163 (2016) 370–38.
- [4] G. Wang, L. Huang, H. Tu, H. Zhou, X. Chen, J. Xu, Stable lean co-combustion of ammonia/methane with air in a porous burner, *Applied Thermal Engineering*, 248(2024) 123092.
- [5] C. Rodolfo, C. Rocha, Filipe Ramos, Mário Costa, X. S. Bai. Combustion of NH₃/CH₄/Air and NH₃/H₂/Air Mixtures in a Porous Burner: Experiments and Kinetic Modeling, *Energy & Fuels*, 33(12) (2019) 12767-12780.
- [6] S. M. Hashemi, P. Wang, C. Mao, K. Cheng, Y. Sun, Z. Yin, Experimental study on the pollutant emissions of premixed ammonia/methane/air flame within porous burner, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 238(2024) 4139-4136.
- [7] R. C. Catapan, A. A. M. Oliveira, M. Costa, Non-uniform velocity profile mechanism for flame stabilization in a porous radiant burner, *Experimental Thermal and Fluid Science*, 35 (2011) 172-179.
- [8] L. Xu, Y. Chang, M. Treacy, Y. Zhou, M. Jia, X. S. Bai, A skeletal chemical kinetic mechanism for ammonia/n-heptane combustion, *Fuel*, 331 (2023) 125830.

مطالعه عددی حدود شعله‌وری احتراق پیش آمیخته مخلوط آمونیاک-متان در یک مشعل محیط متخلخل

مهدی سپه‌وند، سید عبدالمهدی هاشمی*، علی عارف منش

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران
*نویسنده عهده دار مکاتبات: Hashemi@kashanu.ac.ir

چکیده

هدف از مطالعه حاضر بررسی عددی اثر پارامترهای نسبت هم‌ارزی، سرعت ورودی و نسبت آمونیاک به متان در سوخت ورودی، بر حدود شعله‌وری مشعل و توزیع دمای شعله مخلوط آمونیاک-متان در یک مشعل محیط متخلخل است. بدین منظور از روش حجم محدود و به‌صورت عددی با استفاده از نرم‌افزار فلوئنت ۲۲ و یک سینتیک شیمیایی شامل ۶۹ گونه و ۳۸۹ واکنش استفاده شده است. نتایج نشان داد، با افزایش نسبت هم‌ارزی تا ۱، بیشینه دمای فاز گاز و جامد افزایش و بعداز آن کاهش می‌یابد. همچنین در سرعت ورودی مختلف، با افزایش نسبت هم‌ارزی تا ۱/۱، موقعیت ناحیه شعله به سمت بالادست مشعل حرکت می‌کند و بعداز آن ناحیه شعله به سمت پایین‌دست حرکت می‌کند. همچنین مشاهده شد با افزایش نسبت هم‌ارزی از ۰/۷ به ۱، حداقل سرعت ورودی برای حد پایین حدود شعله‌وری به ترتیب از ۰/۱ به ۰/۱۶۳ متر بر ثانیه یعنی معادل ۵۷٪ افزایش و حداکثر سرعت ورودی برای حد بالای حدود شعله‌وری به ترتیب از ۰/۱۴ به ۰/۲۴۴ متر بر ثانیه یعنی معادل ۶۳٪ افزایش می‌یابد. در نسبت هم‌ارزی ثابت با افزایش درصد آمونیاک، دمای بیشینه فاز گاز و جامد کاهش می‌یابد. همچنین با تغییر هم‌زمان نسبت هم‌ارزی و درصد آمونیاک، بیشترین و کمترین بازه استفاده از آمونیاک در نسبت هم‌ارزی ۱ بین ۱۰۰٪-۱۰٪ و نسبت هم‌ارزی ۱/۴ بین ۳۰٪-۱۰٪ مشاهده شد.

کلمات کلیدی

مشعل متخلخل، سوخت آمونیاک، پایداری شعله، احتراق پیش آمیخته، نسبت هم‌ارزی.

با افزایش جمعیت در جهان و فرآیندهای صنعتی و افزایش تقاضای مصرف انرژی با سوخت‌های هیدروکربنی، انتشار گازهای گلخانه‌ای نیز افزایش یافته است و انتشار این گازها باعث آلودگی محیط‌زیست شده است. انتشار گازهای گلخانه‌ای مانند گاز دی‌اکسید کربن، به تنهایی سبب افزایش حدود ۳۰٪ گرمای جهانی شده است [۱]. برای کاهش این گازها پژوهشگران به فکر استفاده از انرژی‌های تجدید پذیر و زیست‌گازها افتادند. با این حال، استفاده از منابع تجدید پذیر نظیر باد، انرژی خورشیدی و جزر و مد، مسئله ذخیره انرژی، بخصوص ناکارآمدی و هزینه‌های ذخیره‌سازی را افزایش می‌دهد. علاوه بر این جایگزین کردن آن‌ها در مشعل‌های سنتی نیز دشوار است؛ بنابراین به دنبال سوخت دیگری برای جایگزین کردن سوخت‌های فسیلی معمولی اهمیت بسیار دارد [۱]. امروزه به‌منظور کاهش انتشار کربن و رسیدن به هدف انتشار کربن صفر، استفاده از سوخت‌های جایگزین در سیستم‌های احتراقی بسیار ضروری است.

به این منظور از هیدروژن به‌عنوان یکی از محبوب‌ترین سوخت‌ها به دلیل محتوای کربن صفر و عملکرد بالا استفاده می‌شود. جایگزین کردن سوخت‌ها با هیدروژن می‌تواند آلاینده‌گی را بهبود بخشد، اما هیدروژن به‌طور طبیعی در طبیعت یافت نمی‌شود و باید طی یک سری فرایند خاص تولید شود، همچنین، یک مانع دیگر، تجهیزات پرهزینه برای ذخیره سوخت هیدروژن مایع و انتقال آن است که همین امر مانع کاربرد گسترده آن می‌شود [۱]. به همین منظور از آمونیاک^۱ به‌عنوان یک سوخت جایگزین جذاب که دارای ۱۷/۸٪ هیدروژن است در احتراق استفاده می‌شود. از طرفی منابع متعدد تولید و سنتز آمونیاک در جهان وجود دارد که شامل گاز طبیعی با ۷۲٪، زغال‌سنگ با ۲۲٪، نفت کوره ۴٪، نفتا ۱٪ و سایر انرژی‌ها است. شایان‌ذکر است که سالانه بالغ بر ۱۸۰ میلیون تن آمونیاک در سراسر جهان تولید می‌شود که آن را به دومین ماده شیمیایی تجاری در جهان تبدیل کرده است [۲].

در مقایسه با سوخت‌های هیدروکربنی سنتی، آمونیاک دارای واکنش‌پذیری کم، زمان تأخیر اشتعال بالا، سرعت شعله کم و دامنه اشتعال‌پذیری پایین‌تری است به همین دلیل برای غلبه بر این چالش‌ها، تحقیقات زیادی توسط محققان انجام شده است. در حال حاضر سه روش شناخته‌شده برای بهبود واکنش‌پذیری آن‌ها وجود دارد. اولین راه، اضافه کردن سوخت‌های هیدروکربنی سنتی نظیر هیدروژن، مونواکسید کربن، متان، دی‌متیل اتر، گازوئیل، دیزل، سوخت‌های سنگین، گاز سنتز و... است.

دومین راه استفاده از فناوری احتراق اکسیژن غنی برای افزایش شدت احتراق و آخرین راه آن افزایش دمای اولیه احتراق است. امروزه پژوهش در مورد احتراق آمونیاک به‌صورت عددی و تحلیل سینتیک احتراق و هم به‌صورت تجربی در حال انجام است. اولین کاربرد آمونیاک در سیستم‌های احتراق واقعی در سال ۱۹۴۵ توسط کراک منتشر شد [۳] که در جریان جنگ جهانی دوم، مخلوطی از آمونیاک و گاز زغال‌سنگ، به‌عنوان ابزار برای جبران کمبود سوخت دیزل در موتور اتوبوس‌های غیرنظامی مورد استفاده قرار گرفت. این آزمایش موفقیت‌آمیز بود، اگرچه زمانی که جنگ به پایان رسید استفاده از آن متوقف شد. اخیراً تحقیقات تجربی و عددی به این نتیجه رسیده‌اند که این چالش‌ها عمدتاً ناشی از سرعت شعله کم آمونیاک هستند که حدود ۵ برابر پایین‌تر از سرعت شعله متان است و برای حل این مشکلات، مخلوط‌های سوخت آمونیاک با ترکیبات دیگر مورد تحقیق قرار گرفته است.

مورچ و همکاران [۴] احتراق آمونیاک-هیدروژن را در موتور اشتعال جرقه‌ای^۲ مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها دریافتند که انتشار گازهای گلخانه‌ای بالاتر با درصد هیدروژن بیشتر در مخلوط و نسبت هوای اضافی از ۱/۱ تا ۱/۴ رخ می‌دهد، همچنین دریافتند که کاهش آلاینده‌گی پس از احتراق، می‌تواند حد خود را به آلاینده‌گی گازهای احتراق بنزین کاهش دهد و در نهایت به این نتیجه رسیدند که ترکیب گاز آمونیاک-هیدروژن جایگزین مناسبی برای سوخت‌های فسیلی در موتورهای اشتعال جرقه‌ای به لحاظ بهره‌وری و قدرت هستند. والرا-مدینا و همکاران [۵] احتراق ترکیبات سوخت آمونیاک-هیدروژن و آمونیاک-متان را در شعله چرخشی بررسی کردند. آن‌ها دریافتند که مخلوط‌های سوخت آمونیاک-هیدروژن محدوده باریک‌تری از نسبت هم ارزی که شعله پایدار است را ارائه می‌دهد و انتشار گازهای گلخانه‌ای ناکس^۳ می‌تواند به حداکثر مقادیر ۴۵۰۰ پی پی ام^۴ برسد. برای مخلوط‌های سوخت آمونیاک-متان، پایداری شعله

¹ NH₃

² Spark-ignition engine

³ NO_x

⁴ Part per million (ppm)

برای دامنه وسیع تری از نسبت‌های ارزی به دست آمد، درحالی‌که انتشار گازهای گلخانه‌ای ناکس به حداکثر مقادیر ۲۶۰۰ پی پی ام در نزدیکی حالت استوکیومتری رسید.

کوراتا و همکاران [۶] احتراق آمونیاک خالص و آمونیاک-متان را در یک توربین گاز دومرحله‌ای بررسی نمودند. برای آمونیاک خالص، میزان انتشار ناکس کم‌تر از ۱۰۰۰ پی پی ام بود. آن‌ها استدلال کردند که ایجاد نواحی غنی و ضعیف مجزا در داخل محفظه احتراق منجر به واکنش بین آمونیاک نسوخته و ناکس می‌شود که این امر انتشار کلی ناکس را کاهش می‌دهد. همچنین این امر منجر به غلظت بالای آمونیاک (در حدود ۱۵۰۰ پی پی ام) در خروجی محفظه احتراق می‌شود. در مقابل احتراق سوخت آمونیاک-متان منجر به انتشار بسیار کم آمونیاک (در حدود ۳۰ پی پی ام) ولی ناکس بیشتر می‌شود. آن‌ها همچنین مشاهده کردند که با افزایش غلظت آمونیاک تا ۰/۶ ناکس افزایش و بعدازآن کاهش می‌یابد.

ردی و همکاران احتراق غیر پیش آمیخته آمونیاک-متان در محفظه احتراق حلقوی محیط متخلخل توربین گازی را به‌صورت عددی و تجربی بررسی کردند. نتایج نشان داد زمانی که از دولایه محیط متخلخل با چگالی حفره تخلخل ۱۰^۱ و ۲۰ استفاده می‌شود پایداری شعله به نسبت یک‌لایه تخلخل افزایش می‌یابد همچنین دمای گاز خروجی زمانی که از دولایه با تخلخل ۱۰ و ۲۰ استفاده می‌شود به نسبت زمانی که از چگالی حفره ۱۰ استفاده می‌شود کمتر است اما دمای پیش گرم حالت یک‌لایه بیشتر است [۷].

تابع جماعت و همکاران احتراق آمونیاک-متان در محفظه احتراق میکرو توربین گازی در شرایط اتمسفریک در دو توان حرارتی را به‌صورت تجربی بررسی نمودند. نتایج نشان داد که با افزایش درصد آمونیاک در سوخت، بیشینه دمای شعله کاهش پیدا می‌کند. همچنین، افزودن آمونیاک، علی‌رغم عدم کاهش CO، افزایش شدید مقدار NOx تولیدی محفظه را به همراه دارد [۸].

تیان و همکاران [۹] به‌صورت تجربی و عددی احتراق پیش مخلوط آمونیاک/متان/اکسیژن/آرگون را بررسی نمودند و در این تحلیل یک سینتیک شیمیایی احتراق با شامل ۸۴ گونه و ۷۰۳ واکنش استفاده و معرفی نمودند و نتایج نشان داد با افزایش غلظت آمونیاک، ناکس افزایش می‌یابد. اوکافور و همکاران [۱۰] مکانیزم احتراق تیان و جی آر آی ۲۳ را تلفیق و یک مکانیزم با ۵۹ گونه و ۳۵۶ واکنش را معرفی نمود. این مکانیزم با اطلاعات یک محفظه استوانه‌ای حجم ثابت که در دما و فشار اتمسفر و کسر مولی آمونیاک بین ۰-۰/۳ در احتراق آمونیاک-متان صحت سنجی شد. ژیاو و همکاران [۱۱] احتراق مشعل آمونیاک-متان با استفاده از مکانیزم کونانوف و با استفاده از یک مشعل یک‌بعدی برای به دست آوردن زمان تأخیر اشتعال شبیه‌سازی نمودند. نتایج آن‌ها نشان داد که ناکس با افزایش غلظت درصد آمونیاک تا ۵۰٪ افزایش و بعدازآن کاهش می‌یابد، همچنین بیشینه انتشار ناکس در حوالی حالت استوکیومتری است و در حالت‌های کمتر و بیشتر از حالت استوکیومتری این مقدار کمتر است.

راموس و همکاران [۱۲] احتراق پیش مخلوط سوخت آمونیاک-متان را مورد بررسی قرار دادند. نتایج آن‌ها نشان داد که ناکس با افزایش غلظت درصد آمونیاک تا ۵۰٪ افزایش و بعدازآن کاهش می‌یابد، همچنین این مقدار با افزایش نسبت هم ارزی نیز افزایش می‌یابد. آن‌ها از مکانیزم‌های شیمیایی احتراق برای پیش‌بینی داده‌های تجربی استفاده نمودند و به‌طور قابل توجهی در اکسیدهای نیتروژن و انتشار مونواکسید کربن اختلاف‌های بزرگ را برای اغلب مکانیزم‌های مورد استفاده مشاهده نمودند.

تاکنون مطالعات محدودی در زمینه احتراق سوخت آمونیاک در مشعل محیط متخلخل چه به‌صورت تجربی و عددی انجام شده است که در ذیل این مطالعات بررسی می‌شود.

نوذری و همکاران [۱۳] نیز مطالعه‌ای تجربی بر روی احتراق ترکیبات سوخت آمونیاک-هیدروژن در یک مشعل محیط متخلخل سیلیکون کارباید^۳ انجام دادند. آزمایش‌های پایداری نشان داد که مشعل متخلخل قادر به احتراق مؤثر مخلوط‌های سوخت با مقادیر بالای آمونیاک است. برکمن و همکاران [۱۴] احتراق آمونیاک خالص را در یک مشعل محیط متخلخل بررسی نمودند و حداکثر مقادیر مونواکسید نیتروژن^۴ را برای نسبت هم ارزی ۰/۹ مشاهده کردند. آن‌ها از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف برای پیش‌بینی داده‌های تجربی استفاده نمودند که تفاوت و اختلاف‌های مهمی را برای بسیاری از مکانیزم‌ها، به‌خصوص در منطقه بعد از شعله، یافتند.

¹ 1 Pore per Inch (ppi)

² GRI-Mech 3.0

³ Silicon Carbide (SiC)

⁴ Nitrogen Oxide (NO)

ویگنات و همکاران [۱۵] پایداری و انتشار آلاینده‌گی در مشعل آمونیاک- هیدروژن در محیط متخلخل را به صورت تجربی و عددی بررسی کردند. نتایج نشان داد که محیط متخلخل به دلیل گردش انتقال حرارت جابجایی و تشعشع بهتر، سبب افزایش پایداری و استفاده از بازه نسبت هم‌ارزی بیشتر و بهبود سرعت شعله کم آمونیاک می‌شود. همچنین برای شرایط غنی، انتشار NO با افزایش نسبت هم‌ارزی و کاهش درصد H₂ کاهش می‌یابد اما انتشار NH₃ نسوخته افزایش پیدا می‌کند. لی و همکاران [۱۶] ویژگی‌های احتراق شعله آمونیاک با افزودن هیدروژن به آن را در مشعل متخلخل بررسی نمودند. نتایج نشان داد که برای شعله آمونیاک خالص شعله‌های پایدار زمانی قابل‌دستیابی هستند که سرعت ورودی از ۳ تا ۷ متر بر ثانیه و نسبت هم‌ارزی از ۰/۹ تا ۱/۲ متغیر باشد. همچنین دمای احتراق شعله آمونیاک با افزایش نسبت هیدروژن افزایش می‌یابد.

وانگ و همکاران [۱۷] پایداری احتراق آمونیاک-متان در محیط متخلخل دولایه را در شرایط رقیق سوخت بررسی کردند. نتایج نشان داد که پایداری مشعل در نسبت هم‌ارزی ۰/۵ هم به دست آمد. همچنین انتشار آلاینده NO با افزایش نسبت هم‌ارزی و نسبت متان، کاهش می‌یابد؛ و این مقدار در نسبت هم‌ارزی ۰/۹ به ۸۴۳ پی پی ام و در نسبت هم‌ارزی ۱/۳ به ۱۵۰ پی پی ام رسید. روچا و همکاران [۱۸] احتراق آمونیاک- متان- هوا و احتراق آمونیاک- هیدروژن- هوا را در یک مشعل محیط متخلخل به صورت تجربی و سینتیک شیمیایی بررسی نمودند. در این پژوهش آن‌ها انتشار ناکس، مونواکسید کربن و آمونیاک نسوخته را بررسی نمودند. نتایج تجربی برای سوخت آمونیاک- متان نشان داد که بیشینه مقدار ناکس در محدوده درصد غلظت ۵۰٪ اتفاق می‌افتد در حالی که در احتراق آمونیاک- هیدروژن این مقدار در محدوده‌های ۵۰٪ و ۸۰٪ اتفاق می‌افتد. داده‌های انتشار مونواکسید کربن نشان‌دهنده احتراق کامل متان است اما آمونیاک نسوخته موجود در دودکش، اکسیداسیون ناقص آن را برای شرایط مورد مطالعه نشان داد. شبیه‌سازی سینتیک شیمیایی الگوهای انتشار ناکس مشابهی را نشان داد اما در اکثر موارد به طور قابل توجهی داده‌های تجربی را بیش از حد پیش‌بینی، نشان داد. هاشمی و همکاران [۱۹] احتراق سوخت آمونیاک- هیدروژن در محیط متخلخل را به صورت عددی بررسی نمودند. در این پژوهش ویژگی‌های احتراق از نظر ساختار متخلخل، نسبت هم‌ارزی و اجزای سوخت و روند انتشار آلاینده‌ها مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که حدود پایداری شعله با افزایش نسبت هم‌ارزی صرف‌نظر از کسر آمونیاک افزایش می‌یابد. همچنین افزودن آمونیاک در مخلوط سوخت باعث کاهش پایداری شعله و ضخامت شعله حرارتی می‌شود از طرفی منجر به افزایش انتشار ناکس می‌شود. افزایش نسبت هم‌ارزی منجر به کاهش ضخامت شعله حرارتی در شرایط سوخت رقیق شد در حالی که در شرایط غنی، باعث افزایش ضخامت منطقه شعله شد همچنین با افزایش میانگین قطر حفره‌های محیط متخلخل، محدوده پایداری شعله افزایش یافت. هاشمی و همکاران [۲۰] انتشار آلاینده‌های ناکس در سوخت آمونیاک - متان محیط متخلخل را به صورت تجربی بررسی کردند. نتایج نشان داد با افزایش کسر آمونیاک پایداری شعله کاهش می‌یابد. همچنین مقدار NO با افزایش درصد آمونیاک تا ۵۰٪ افزایش و بعد از آن کاهش می‌یابد و همچنین افزایش کسر آمونیاک باعث کاهش مقدار CO می‌شود.

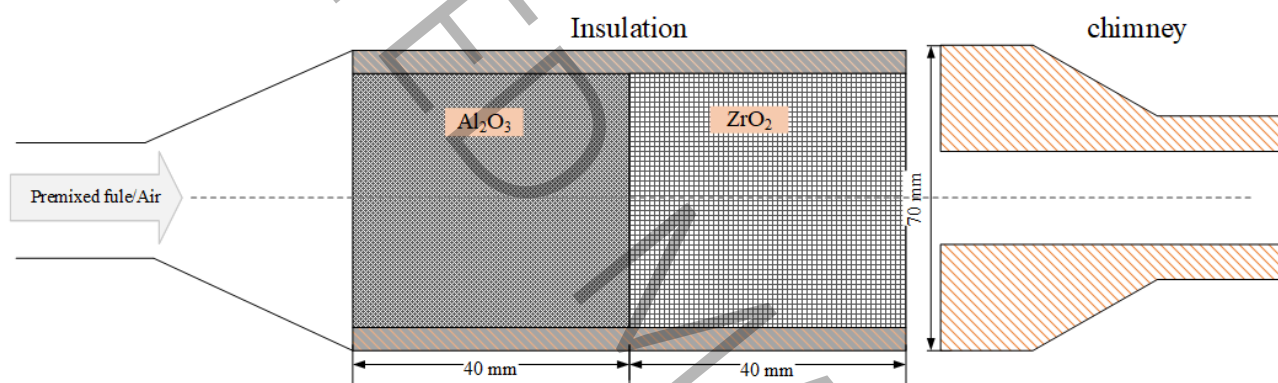
مطالعات انجام‌شده در این زمینه بیانگر آن است که با استفاده از محیط متخلخل می‌توان در محدوده‌های رقیق نیز شعله پایدار داشت. در این شرایط میزان آلاینده ناکس به شدت کاهش می‌یابد. همچنین مطالعات تجربی و عددی انجام‌شده در این زمینه اثر پارامترهایی مانند نسبت هم‌ارزی، سرعت جریان ورودی، مشخصه‌های ترموفیزیکی محیط متخلخل و ترکیبات سوختی مختلف را بر محدوده حدود شعله‌وری شعله و مقدار آلاینده‌ها بررسی نموده‌اند. نتایج در حالت کلی گویای آن است که استفاده از محیط متخلخل باعث بهبود محدوده حدود شعله‌وری، کاهش تولید آلاینده‌ها و افزایش بازده تشعشعی مشعل در ضمن افزایش افت فشار می‌شود. از طرفی مطالعات انجام‌شده نشان داد که سوخت آمونیاک عاری از کربن است به همین دلیل عاری از آلاینده‌گی نظیر دی‌اکسید کربن، مونواکسید کربن است. با توجه به پژوهش‌هایی که در بالا ذکر شد و تا امروز در مورد احتراق آمونیاک بررسی شده و مشخص گردید معایب گاز آمونیاک از جمله سرعت شعله پایین، حدود شعله‌وری پایین و انتشار گاز گلخانه‌ای ناکس بالا و... است.

اکثر پژوهش‌هایی که تاکنون در احتراق آمونیاک انجام‌شده چه به صورت عددی و یا تجربی متمرکز بر خصوصیات سینتیک شیمیایی ایجادشده و بررسی پارامترهایی نظیر سرعت شعله آرام و زمان تأخیر اشتعال احتراق در شعله آمونیاک بوده است. هم‌چنین در سال‌های اخیر احتراق آمونیاک در محیط متخلخل به صورت محدود و بیشتر به صورت تجربی بررسی شده است. به نظر می‌رسد که راهکار استفاده از مزایای مشعل متخلخل نظیر پایداری بهتر احتراق و کاهش تولید NOx می‌تواند برای کاهش معایب و مشکلات احتراق مخلوط آمونیاک مناسب باشد. به همین دلیل در این پژوهش برای بررسی بهبود پارامترهای احتراقی، استفاده از یک مشعل متخلخل جهت

احتراق هم‌زمان مخلوط سوخت آمونیاک و متان با استفاده از مطالعه عددی در دستور کار قرار گرفته است. بنابراین هدف مطالعه حاضر، مطالعه عددی پایداری شعله احتراق مخلوط آمونیاک-متان در یک مشعل محیط متخلخل است و اثرات پارامترهای مختلف از قبیل نسبت هم‌ارزی، سرعت ورودی و نسبت آمونیاک به گاز متان در سوخت ورودی، بر وضعیت پایداری شعله و توزیع دمای شعله در نرم‌افزار فلونت بررسی شده است.

۲- مشخصات و هندسه مشعل متخلخل

به‌منظور بررسی و شبیه‌سازی عددی پایداری شعله احتراق مخلوط آمونیاک-متان، از مشعل مورد مطالعه روچا و همکاران استفاده شده است [۱۸]. مطابق با شکل ۱ در این مشعل از دو لایه متخلخل که در لایه اول محیط متخلخل از جنس سرامیک آلومینا^۱ با چگالی حفره ۴۰ و قطر ۷۰ میلی‌متر و طول ۴۰ میلی‌متر و همچنین لایه دوم محیط متخلخل از جنس زیرکونیا^۲ با چگالی حفره ۱۰ و قطر ۷۰ میلی‌متر و طول ۴۰ میلی‌متر استفاده شده است همچنین خواص ماتریس‌های متخلخل که مطابق با خواص استفاده شده در پژوهش کاتاپان و همکاران است [۲۱] است، در جدول ۱ آورده شده است. لازم به ذکر است که خواص جنس زیرکونیا به دلیل نحوه ساخت پیچیده آن، ترکیبی از چندین جنس مختلف است که شرح کامل خواص آن در پژوهش کاتاپان و همکاران آورده شده است [۲۱].



شکل ۱. طرح‌واره محفظه احتراق مورد مطالعه [۱۸]

Fig. 1. Schematic of the combustion chamber under study [18]

جدول ۱. خواص ماتریس‌های متخلخل

Table 1. Properties of porous matrices

پارامتر	واحد	زیرکونیا	آلومینا
ظرفیت گرمایی ویژه	C_p [J/kg.k]	۱۲۰۰	۳۹۸۷
چگالی	ρ [kg/m ³]	۴۵۰۰	۳۷۵۰
هدایت حرارتی در ۲۰ درجه سانتی‌گراد	W/mK	۱۵-۱۰	۳۰-۲۰
هدایت حرارتی در ۱۰۰۰ درجه سانتی‌گراد	W/mK	۳-۲	۶-۵
تخلخل	-	۰/۸	۰/۸

۳- معادلات حاکم بر جریان سیال در محیط متخلخل

در این بخش ابتدا معادلات حاکم بر جریان سیال در مشعل متخلخل مورد بررسی قرار گرفته است. متغیرهای مطلوب در بحث مشعل‌های متخلخل، متغیرهای دما، سرعت، فشار، چگالی و غلظت گونه‌های شیمیایی است.

هندسه‌ی مورد نظر دوبعدی و تقارن محوری در نظر گرفته شده است. به علت اینکه در مشعل‌های متخلخل، دو فاز گاز و جامد حضور دارند، به‌منظور مدل‌سازی دقیق‌تر از فرض عدم تعادل حرارتی مابین فاز گاز و جامد (عدم تساوی دمای گاز و جامد) استفاده شده است. به عبارت دیگر، دو

¹ Al₂O₃

² ZrO₂

معادله‌ی انرژی مجزا، برای هریک از فازها حل خواهد شد. اثر تشعشع گاز در برابر تشعشع ماتریس جامد، ناچیز در نظر گرفته شده است همچنین رفتار محصولات و واکنش‌دهنده‌ها، به صورت گاز ایده آل تراکم ناپذیر لحاظ شده است.

معادله پیوستگی

$$\nabla \cdot (\rho_g \varepsilon \bar{u}) = 0 \quad (1)$$

معادله مومنتوم

$$\nabla \cdot (\rho_g \varepsilon \bar{u} \bar{u}) = -\varepsilon \nabla p + \nabla \cdot (\mu_g \varepsilon \nabla \bar{u}) - (\nabla p)_p \quad (2)$$

که در این رابطه \bar{u} بیانگر سرعت ذاتی سیال و ε بیانگر تخلخل محیط است. عبارت $(\nabla p)_p$ که در سمت راست معادله‌ی بالا آورده شده است افت فشار ناشی از وجود محیط متخلخل است که توسط معادله تصحیح شده ارگن محاسبه می‌گردد [۲۲].

$$\nabla p = \frac{180(1-\varepsilon)^2 \mu}{\varepsilon^3 d_p^2} \bar{u} + \frac{1.8(1-\varepsilon)|\bar{u}|\bar{u}}{\varepsilon^3 d_p} \quad (3)$$

در معادله بالا ترم اول و دوم به ترتیب تانسورهای تراوایی برای جریان داری و غیر داری هستند. در رابطه بالا d_p قطر متوسط فوم سرامیکی است و از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$d_p = \frac{1}{100 ppc} \sqrt{\frac{4\varepsilon}{\pi}} \quad (4)$$

که در این رابطه ppc چگالی حفره برحسب واحد سانتی‌متر است.

معادله انرژی در فاز گاز

$$\nabla \cdot (\rho_g c_{p,g} \bar{u} \varepsilon T_g) + \varepsilon \sum_k \rho_g Y_k V_k c_{p,k} \nabla T = \nabla \cdot (\varepsilon \lambda_g \nabla T_g) - \varepsilon \sum_k \omega_k MW_k h_k + H_v (T_s - T_g) \quad (5)$$

در رابطه بالا c_p گرمای ویژه سیال، λ_g ضریب هدایت حرارتی سیال، T_g دمای گاز، T_s دمای جامد، H_v ضریب انتقال حرارت حجمی، ω_k نرخ مولی تولید گونه k ام h_k آنتالپی گونه k ام، W_k وزن مولکولی گونه k ام است. در این معادله ترم دوم و سوم سمت راست معادله به ترتیب معرف انرژی آزاد شده بر اثر واکنش‌های شیمیایی و انتقال حرارتی میان فاز گاز و جامد است.

معادله انرژی در فاز جامد

$$\nabla \cdot (\lambda_{s,eff} \nabla T_s) + H_v (T_g - T_s) = 0 \quad (6)$$

در معادله بالا $\lambda_{s,eff}$ ضریب هدایت حرارتی مؤثر است که شامل دو ترم هدایت حرارتی محیط متخلخل و هدایت حرارتی وابسته به تشعشع است [۲۳].

$$\lambda_{s,eff} = \lambda_{s,cond} + \lambda_{s,rad} \quad (7)$$

$$\lambda_{s,rad} = \frac{16\sigma T_s^3}{3\beta(1-\varepsilon)} \quad (8)$$

در این معادله ضریب خاموشی، خود از طریق رابطه‌ی محاسبه می‌گردد.

$$\beta = \frac{3}{d_p}(1 - \varepsilon) \quad (9)$$

در نتیجه ضریب هدایت مؤثر ماتریس جامد را می‌توان این‌طور بیان کرد:

$$\lambda_{s,eff} = \lambda_{s,cond} + \frac{16\sigma d_p T_s^3}{9(1 - \varepsilon)} \quad (10)$$

از آنجایی که دمای گاز و جامد متفاوت هستند؛ بنابراین برای هر فاز معادله انرژی به صورت مجزا حل شده است. دو معادله از طریق ترم انتقال حرارت حجمی به همدیگر کوپل می‌شوند. ضریب انتقال حرارت حجمی توسط رابطه زیر بیان می‌شود [۲۴].

$$H_v = \frac{Nu_v \lambda_g}{d_p^2} \quad Nu_v = 0.146 Re^{0.96} \quad (11)$$

همچنین می‌توان رابطه‌ای برای ضریب انتقال حرارت حجمی با ضریب انتقال حرارت جابجایی با توجه به سطح مقطع به ازای واحد حجم ماده متخلخل (a_v) به دست آورد. در این رابطه a_v نماینده‌ی سطح آزاد حفره‌ها بر واحد حجم ماتریس جامد است و از رابطه پیشنهادی فو و همکاران [۲۵] به دست می‌آید.

$$H_v = a_v h \quad a_v = 169.4 \times ppc \quad (12)$$

معادله بقای گونه‌های شیمیایی

$$\nabla \cdot (\rho_g \varepsilon \bar{u} Y_k) + \nabla \cdot (\rho_g \varepsilon Y_k V_k) = \varepsilon \dot{\omega}_k MW_k \quad (13)$$

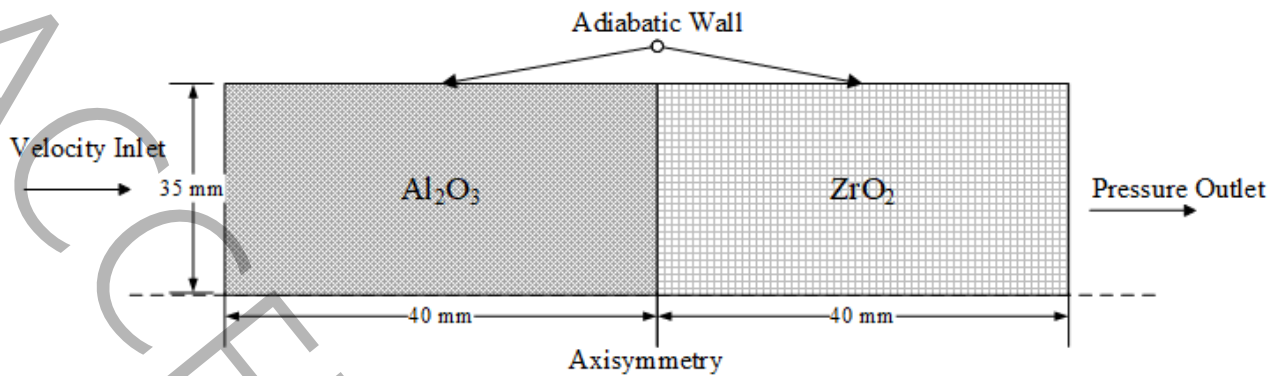
در این معادله‌ی جمله‌ی چشمه‌ی $\varepsilon \dot{\omega}_k MW_k$ مبین نرخ تولید یا مصرف گونه‌ی k ام در طی واکنش شیمیایی است. همچنین در این معادلات، V_k سرعت نفوذ گونه‌ی k ام است.

معادله‌ی حالت گاز ایده آل

$$\rho_g = \frac{p}{R_u T_g} \frac{1}{\sum_{i=1}^N \left(\frac{Y_i}{MW_i} \right)} \quad (14)$$

۴- شرایط اولیه و مرزی

برای حل عددی معادلات حاکم بر مسئله نیاز به شرایط مرزی مناسب است. در مرز ورودی دمای مخلوط سوخت و هوا برابر ۳۰۰ کلوین و سرعت جریان محوری در نظر گرفته شده است. در مرز خروجی از شرط صفر بودن گرادیان در جهت محوری مؤلفه‌های سرعت، دما و گونه‌های شیمیایی استفاده شده است (با فرض به اندازه کافی دور بودن مرز خروجی از محیط متخلخل این فرض قابل قبول است). در مرزهایی که به صورت دیواره می‌باشند از شرط عدم لغزش برای سرعت، صفر بودن گرادیان نفوذ برای گونه‌های شیمیایی و آدیاباتیک بودن برای معادلات انرژی در فاز جامد و سیال استفاده شده است. در مرزهای ابتدا و انتهای ماتریس جامد نیز تبادل حرارت از طریق تشعشع و جابجایی با محیط پیرامون در نظر گرفته شده است. در محل تماس دو محیط متخلخل نیز از شرط اینترفیس استفاده شده است. خط تقارن محوری محفظه احتراق نیز به عنوان شرط مرزی تقارن برای تمام معادلات در نظر گرفته شده است. شرایط مرزی هندسه مورد مطالعه در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل ۲. شرایط مرزی هندسه محفظه مورد مطالعه

Fig. 2. Boundary conditions of the geometry of the chamber under study

شرایط مرزی به کاررفته برای معادلات پیوستگی، انرژی فاز گاز و بقاء گونه‌ها به شرح زیر است. در این روابط x_{in} و x_{out} نشان دهنده‌ی مرز ورودی و خروجی کل ناحیه‌ی حل و x_0 و x_1 نشان دهنده‌ی مرز ابتدا و انتهای محیط متخلخل می‌باشند.

$$T_g = T_{gin} \quad , \quad Y_k = Y_{kin} \quad , \quad v = 0, u = u_0 \quad \text{at : } x = x_0 \quad (15)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial T_g}{\partial x} = \frac{\partial Y_k}{\partial x} = 0 \quad \text{at : } x = x_{out} \quad (16)$$

در خروجی مشعل، به شرط این که محل خروجی به اندازه‌ی کافی از محل شعله دور باشد که در مدل‌سازی حاضر این چنین است، از شرط توسعه یافتگی میدان جریان استفاده می‌شود؛ بنابراین شیب تغییر برای سرعت گاز، دمای گاز و کسر جرمی گونه‌ها برابر با صفر است [۲۶].

شرایط مرزی در مرزهای جامد، بامنظور کردن هر سه شکل انتقال حرارت مؤثر در تبادل انرژی و از برقراری توازن انرژی برای مرزها، به دست می‌آید [۲۷]؛ بنابراین برای معادله‌ی انرژی فاز جامد از شرط مرزی زیر استفاده می‌شود:

$$\left[h_0 (T_{g,0} - T_{s,0}) + e_0 \sigma (T_{surr,0}^4 - T_{s,0}^4) \right] (1 - \varepsilon) = -\lambda_{s,eff,0} \frac{\partial T_s}{\partial x} \quad \text{at : } x = x_0 \quad (17)$$

$$\left[h_l (T_{g,l} - T_{s,l}) + e_0 \sigma (T_{surr,l}^4 - T_{s,l}^4) \right] (1 - \varepsilon) = -\lambda_{s,eff,l} \frac{\partial T_s}{\partial x} \quad \text{at : } x = x_l \quad (18)$$

در این معادلات، زیرنویس‌های 0 و l به ترتیب، نشان دهنده‌ی ورودی و خروجی محیط متخلخل، e ضریب صدور محیط متخلخل و σ ثابت استفان-بولتزمن می‌باشند. T_{surr} نیز دمای محیط ۲۵ درجه سانتی‌گراد می‌باشند.

این شرط با فرض تعادل شار حرارتی ورودی و خروجی در مرزهای جامد به دست آمده است (برآیند سه بردار شار حرارتی تشعشع، رسانش و جابجایی در مرزهای جامد برابر صفر است).

روابط (۱۷) و (۱۸) دربرگیرنده‌ی هر دو شار حرارتی ناشی از جابجایی و تشعشع از سطح محیط متخلخل می‌باشند. احتساب شار تشعشعی در این دو شرط مرزی، نقصان معادله‌ی تقریبی نفوذ جرمی را در مدل‌سازی این مکانیزم انتقال حرارت در نزدیکی مرزهای جامد جبران می‌نماید. روابط فوق جزء شرایط مرزی رایج بوده که بیشترین تطابق را با فیزیک مسئله دارند.

معادلات حاکم بر این مسئله از جمله معادلات بقای جرم، مومنتوم، انرژی فاز گاز و جامد، بقای گونه‌ها و تشعشع داخل محیط متخلخل با در نظر گرفتن فرضیات مناسب و به کمک روش حجم محدود^۱ و الگوریتم سیمپل^۲ به صورت عددی با استفاده از نرم‌افزار فلوئنت ۲۲ حل می‌شوند. وضعیت رژیم جریان داخل محیط متخلخل در حالت پایا و آرام و همچنین فرضیات مناسب مانند شرط عدم تعادل فاز گاز و جامد (از آنجاکه محیط گاز و محیط متخلخل جامد در تعادل حرارتی قرار ندارند، لازم است که معادله انرژی برای هر کدام به صورت جداگانه نوشته شود که شامل ترم هدایت حرارتی در فاز جامد و گاز، انتقال حرارت جابجایی بین فاز جامد و گاز، انتقال حرارت جابجایی با محیط اطراف، تولید حرارت در فاز گاز و تشعشع در فاز جامد است و این دو معادله به وسیله ترم انتقال حرارت جابجایی به یکدیگر جفت می‌شوند) در نظر گرفته شده است. به دلیل محدودیت‌های موجود در کتابخانه‌های پیش‌فرض نرم‌افزار، لازم است که با استفاده از یو دی اف^۳ اطلاعات مورد نیاز در مورد معادلات انرژی فاز جامد و تشعشع محیط متخلخل از جمله برای معرفی ضریب هدایت حرارتی مؤثر به صورت تابعی از دما که شامل دو ترم هدایت حرارتی محیط متخلخل و هدایت حرارتی وابسته به تشعشع (برای حذف معادلات پیچیده تشعشعی درون محیط متخلخل) است به نرم‌افزار اضافه شوند. این برنامه‌های کمکی به زبان برنامه‌نویسی C نوشته می‌شوند و به نرم‌افزار اصلی به صورت دینامیکی ارتباط پیدا می‌کند. به منظور حل عددی مسئله بایستی هندسه مورد نظر شبکه‌بندی شود. پس از انطباق شبکه بر میدان حل، حول هر گره، حجم کنترلی ایجاد می‌شود و از معادلات حاکم روی هر حجم کنترل انتگرال‌گیری می‌شود. سپس دستگاهی از معادلات منفصل شده به صورت جبری به دست می‌آید. لازم به ذکر است که از روش آپویند مرتبه دوم^۴ برای انفصال جملات معادلات مومنتوم و انرژی استفاده می‌شود. دستگاه جبری معادلات حاصل شده با استفاده از الگوریتم مبتنی بر تکرار حل می‌شوند تا معیار همگرایی^۵ ۱۰^{-۶} در آن‌ها ارضا شود. در این مطالعه، از واکنش شیمیایی ژو و همکاران [۲۸] با ۶۹ گونه و ۳۸۹ واکنش برای شبیه‌سازی احتراق آمونیاک - متان با هوا استفاده می‌شود همچنین برای ارزیابی خواص ترموفیزیکی و انتقالی از کتابخانه‌های آماده نرم‌افزار کمکین^۶ استفاده می‌شود.

۶- بررسی استقلال نتایج از شبکه‌بندی

بررسی کردن عدم وابستگی نتایج به دست آمده در یک مطالعه عددی یکی از مواردی است که همواره در این گونه مطالعات مورد توجه قرار می‌گیرد. در روش‌های عددی به دلیل وجود خطاهای ناشی از گسسته سازی بایستی شبکه مناسبی انتخاب شود تا با ریز کردن بیشتر آن در نتایج تغییری حاصل نشود. شبکه به کار گرفته شده در این پژوهش با استفاده از نرم‌افزار انسیس مشینگ^۶ تولید شده و برای تولید شبکه از المان‌های چهاروجهی بهره گرفته شده است. برای استقلال حل عددی از شبکه به کار گرفته شده، از شش شبکه سازمان یافته با تعداد ۴۹۶۸، ۱۱۲۰۰، ۱۷۶۰۰، ۱۸۷۰۰، ۲۲۸۰۰ و ۳۱۰۰۰ سلول استفاده شده است. شکل ۳ و ۴ توزیع دمای فاز گاز و جامد بر روی خط مرکزی مشعل در نسبت هم ارزی ۰/۸ و نسبت سوخت آمونیاک به متان (۸۰/۲۰) و چگالی حفره ۰/۸ در هر دو لایه متخلخل را نشان می‌دهد. همان‌طور که از شکل ۳ مشخص است، بیشینه مقدار دمای گاز و موقعیت ناحیه شعله با تغییر سلول‌های شبکه از ۴۹۶۸ به ۱۸۷۰۰، تغییر زیادی کرده است ولی بعد از آن موقعیت شعله و ماکزیمم دما تغییر آن‌چنانی نداشته است لذا کاهش بیشتر ابعاد شبکه باعث افزایش بی‌پرده در حجم محاسبات می‌شود، همچنین در شکل ۴ مشاهده می‌شود بیشینه دمای فاز جامد تغییر محسوسی نداشته اما موقعیت ناحیه شعله با تغییر سلول‌های شبکه از ۴۹۶۸ به ۱۸۷۰۰ تغییر کرده است ولی بعد از آن تغییر محسوسی مشاهده نمی‌شود بنابراین در این پژوهش از شبکه‌ای با تعداد ۱۸۷۰۰ سلول پس از بررسی استقلال جواب‌ها از شبکه، به منظور حل معادلات حاکم وارد نرم‌افزار فلوئنت شده است.

¹ Finite Volume Method (FVM)

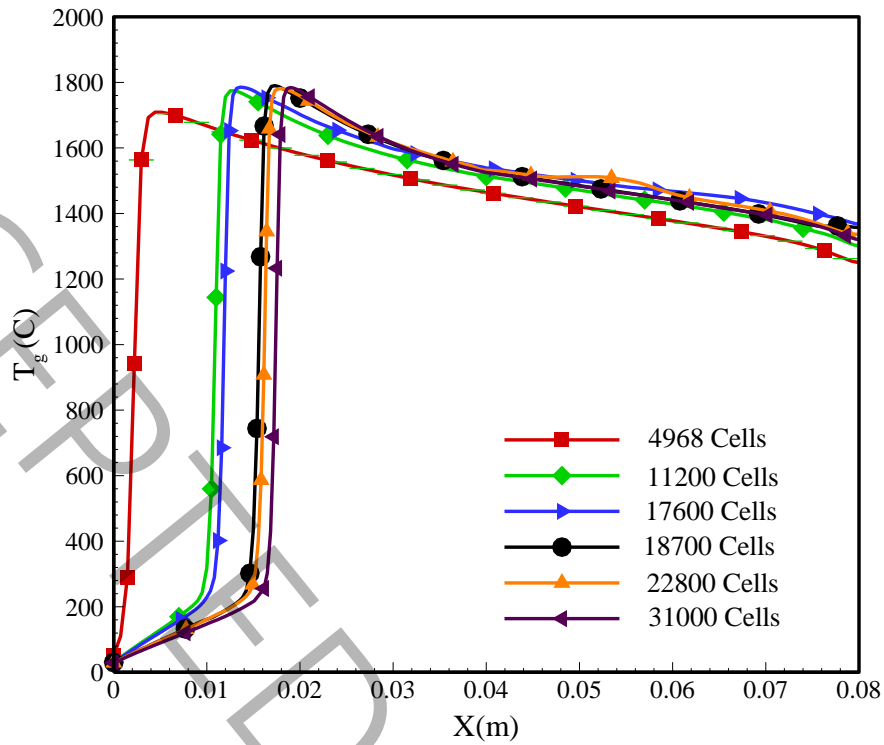
² Simple

³ User Define Function (UDF)

⁴ Second Upwind

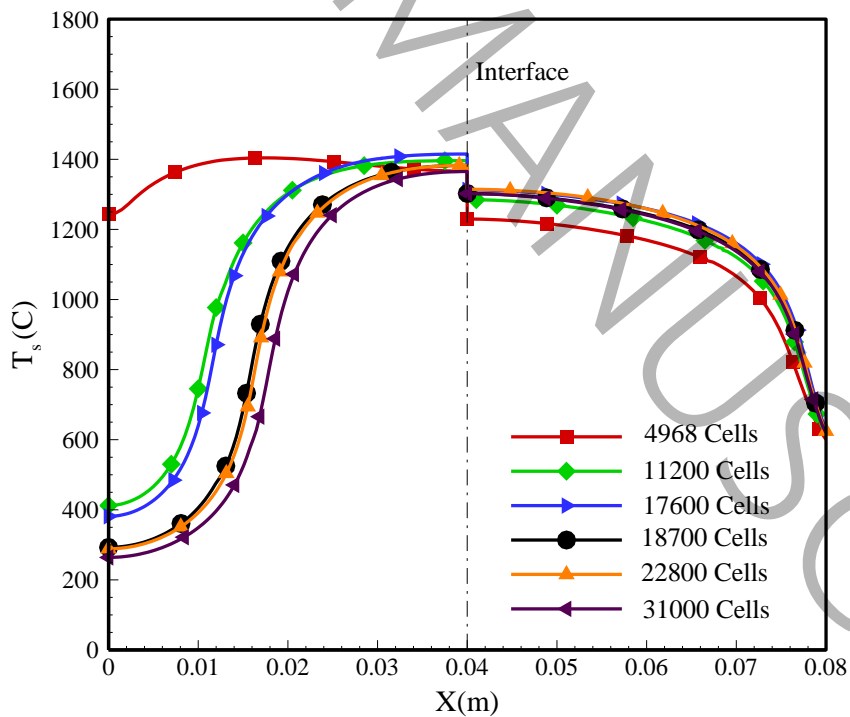
⁵ CHEMKIN

⁶ Ansys Meshing



شکل ۳. توزیع دمای فاز گاز بر روی خط مرکزی مشعل در شش شبکه محاسباتی مختلف

Fig. 3. Temperature distribution of the gas phase along the centerline of the burner in six different computational grids

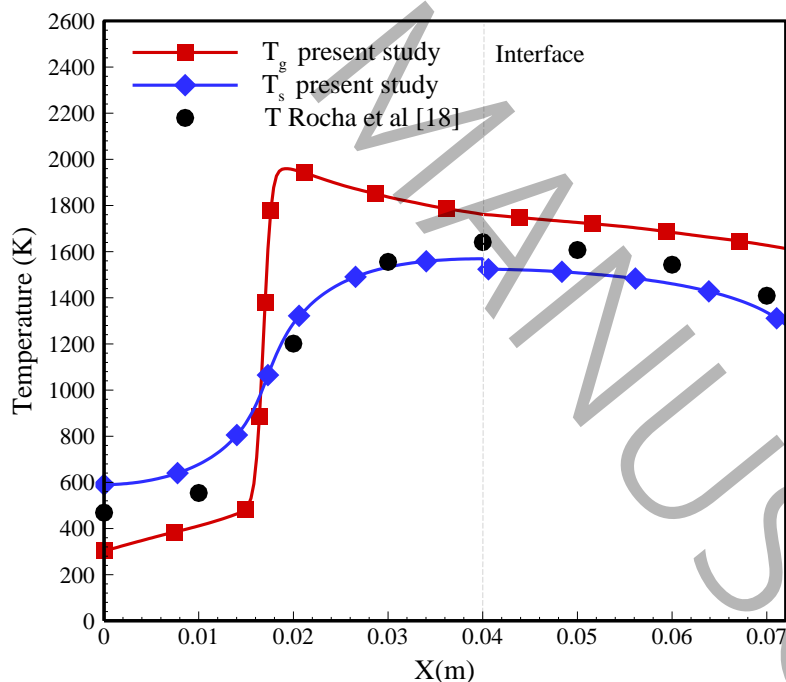


شکل ۴. توزیع دمای فاز جامد بر روی خط مرکزی مشعل در شش شبکه محاسباتی مختلف

Fig. 4. Temperature distribution of the solid phase along the centerline of the burner in six different computational grids

۷- اعتبار سنجی

به منظور اعتبار سنجی، نتایج حاصل از پژوهش حاضر برای سوخت آمونیاک-متان در نسبت هم ارزی ۰/۸ و درصد سوخت آمونیاک به متان (۷۰/۳۰) با نتایج تجربی و آزمایشگاهی روچا و همکاران [۱۸] مقایسه شده است. در این پژوهش از سینتیک شیمیایی ژو و همکاران [۲۸] با ۶۹ گونه و ۳۸۹ واکنش برای شبیه‌سازی احتراق آمونیاک-متان با هوا استفاده می‌شود. در پژوهش تجربی انجام شده به منظور اندازه‌گیری دما در مشعل متخلخل از ۸ ترموکوپل به فاصله یک سانتی‌متر از هم در طول محیط متخلخل استفاده شده است. در این پژوهش نتایج شبیه‌سازی توزیع دمای فاز گاز و جامد سوخت آمونیاک-متان بر روی خط مرکزی مشعل با نتایج تجربی اندازه‌گیری شده مقایسه شده است. به دلیل تماس نوک ترموکوپل با فاز گاز و جامد در واقع دمای اندازه‌گیری شده توسط ترموکوپل، دمایی بین دمای فاز گاز و جامد محیط متخلخل است. همان‌طور که در شکل ۵ مشاهده می‌شود، نتایج عددی، تطابق مناسبی با نتایج آزمایشگاهی دارد. از آنجایی که فرض عدم تعادل حرارتی بین فاز گاز و جامد در نظر گرفته شده، دمای فاز گاز و جامد در هر دو ناحیه ورودی و احتراق متفاوت است. در ناحیه احتراق، دمای گاز بیش‌تر از دمای جامد پیش‌بینی شده است. به علت شروع احتراق دمای گاز در یک لحظه به بیشینه مقدار خود رسیده است. حرارت آزاد شده در ناحیه احتراق توسط انتقال حرارت جابجایی از فاز گاز به ماتریس جامد منتقل شده و ماتریس جامد از طریق هدایت حرارتی جامد به جامد و تابش، حرارت را به ناحیه ورودی انتقال می‌دهد و دمای این ناحیه را افزایش می‌دهد، این افزایش دما باعث پیش گرم شدن گاز ورودی به مشعل شده است. میانگین خطای اندازه‌گیری شده برای فاز جامد شبیه‌سازی شده و دمای ترموکوپل‌ها در ۸ نقطه حدود ۸ درصد است و برای فاز گازی شبیه‌سازی شده و دمای تجربی حدود ۱۳ درصد است. حداکثر خطای عددی در پیش‌بینی دمای بیشینه فاز گاز در محل جبهه شعله (به علت شروع احتراق دمای گاز در یک لحظه به بیشینه مقدار خود می‌رسد) حاصل می‌شود. خطای به وجود آمده در شبیه‌سازی عددی می‌تواند مربوط به خواص ترموفیزیکی فازهای گاز و جامد و همچنین به دلیل اینکه در کار تجربی انجام شده خواص ترموفیزیکی محیط متخلخل زیرکونیا ترکیبی از چندین نوع مختلف سرامیک است که باعث می‌شود در کار عددی خطا ایجاد شود و این خواص به‌طور کامل در مرجع [۲۵] بیان شده است. علاوه بر این استفاده از سینتیک‌های مختلف در پیش‌بینی بیشینه دما در جبهه شعله، تأثیر گذار است.

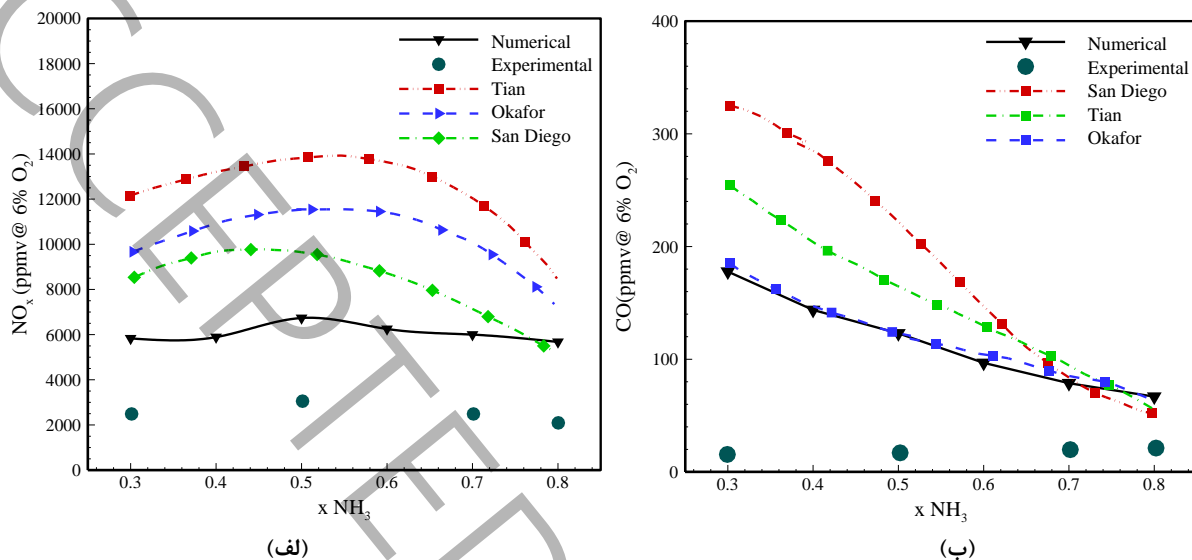


شکل ۵. مقایسه توزیع دمای گاز و جامد برای سوخت آمونیاک-متان بر روی خط مرکزی مشعل با نتایج آزمایشگاهی روچا و همکاران [۱۸]

Fig. 5. Comparison of gas and solid temperature distributions for ammonia-methane fuel along the burner centerline with the experimental results of Rocha et al. [18]

همچنین نتایج شبیه‌سازی حاضر و نتایج تجربی و عددی روچا و همکاران [۱۸] را می‌توان در شکل ۶ برای آلاینده مونواکسید نیتروژن و آلاینده مونواکسید کربن مشاهده کرد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج شبیه‌سازی شده برای آلاینده مونواکسید نیتروژن با نتایج تجربی اختلاف قابل توجهی دارند اما میزان آلاینده مونواکسید نیتروژن شبیه‌سازی حاضر، به نسبت سایر نتایج عددی ارائه شده تطابق مناسبی با نتایج آزمایشگاهی

دارد. همچنین میزان آلاینده مونواکسید کربن شبیه‌سازی حاضر تا بازه درصد آمونیاک ۶۰٪ به نسبت سایر نتایج عددی، به نتایج تجربی نزدیک‌تر است اما در بازه بزرگ‌تر از ۷۰٪، نتایج شبیه‌سازی شده تقریباً نتایج یکسانی ارائه می‌دهند.



شکل ۶. مقایسه میزان آلاینده‌های الف) NO ب) CO شبیه‌سازی عددی با نتایج عددی و آزمایشگاهی روچا و همکاران [۱۸]

Fig. 6. Comparison of the amount of pollutants a) NO b), between numerical simulations and the numerical and experimental results of Rocha et al. [18]

۸- بررسی نتایج

در این بخش، نتایج بررسی‌های انجام‌شده در زمینه‌ی چگونگی اثر گذاری پارامترهای نسبت هم‌ارزی، سرعت ورودی و تغییر درصد سوخت آمونیاک بر روی توزیع دمای فاز گاز و جامد و پایداری و حدود شعله‌وری مخلوط سوخت آمونیاک و متان ارائه و تفسیر می‌گردد. در هر مطالعه‌ی پارامتری فقط یک کمیت که همان کمیت مورد بررسی است تغییر داده می‌شود و سایر پارامترها و شرایط نسبت به حالت پایه بدون تغییر می‌مانند.

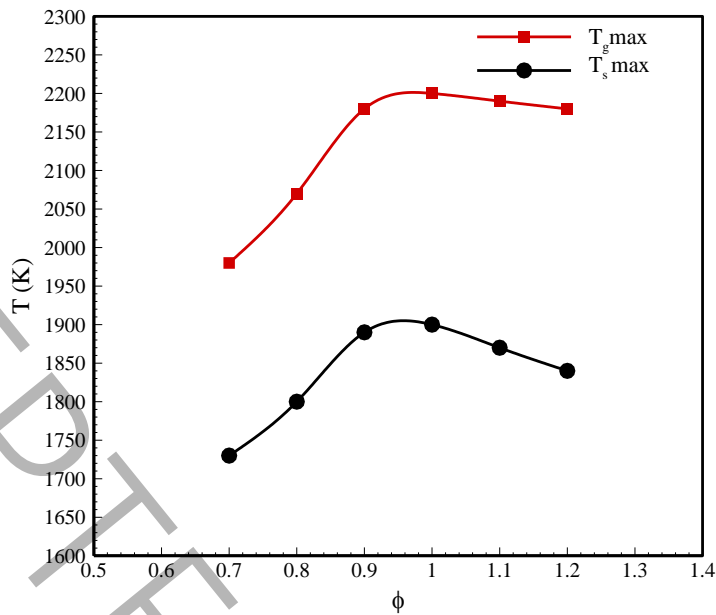
۸-۱- نسبت هم‌ارزی

این کمیت یک مشخصه‌ی اصلی مخلوط سوخت و اکسیدکننده است. نسبت هم‌ارزی یک پارامتر کنترلی مهم در عمل کرد یک مشعل واقعی است؛ بنابراین بررسی اثرات تغییرات این کمیت روی رفتار مشعل ضروری به نظر می‌رسد. برای این منظور حالات ارائه‌شده در سرعت ورودی مخلوط سوخت و هوا، ۰/۲ متر بر ثانیه و درصد آمونیاک ۸۰٪ و درصد تخلخل ۰/۸ برای هر دولایه متخلخل در بازه نسبت هم‌ارزی ۱/۲-۰/۷ مورد ارزیابی قرار می‌گیرند.

نمودارهای بیشینه دمای فازهای گاز و جامد در شکل ۷ مشاهده می‌شوند. در فرآیند احتراق کامل (نسبت هم‌ارزی ۱) بیش‌ترین میزان انرژی حرارتی از واکنش‌های شیمیایی استحصال می‌شود؛ بنابراین همان‌طور که در شکل ۶ مشخص است، در ناحیه‌ی واکنش بیش‌ترین دمای فاز گاز در احتراق استوکیومتری اتفاق می‌افتد. هراندازه که مخلوط سوخت و هوا از حالت استوکیومتری بیش‌تر فاصله می‌گیرد، انرژی آزادشده از واکنش‌های شیمیایی کم‌تر و متعاقب آن دمای فاز گاز کاهش می‌یابد. چون دمای فاز جامد و دمای فاز گاز ارتباط تنگاتنگی باهم دارند، رفتاری مشابه برای دمای محیط متخلخل ملاحظه می‌شود. با دقت در شکل ۷ مشاهده می‌شود که اختلاف بین بیشینه دمای فاز جامد در نسبت‌های هم‌ارزی مختلف از اختلاف مشابه برای فاز گاز کم‌تر است.

به‌عنوان مثال اختلاف دمای مخلوط گازها بین نسبت هم‌ارزی ۱ و نسبت هم‌ارزی ۰/۷ چیزی در حدود ۲۴۰ کلوین است و به نسبت دمای فاز جامد که در حدود ۱۶۰ کلوین است، محسوس‌تر است. یک دلیل این است که تغییر نسبت هم‌ارزی در وهله‌ی اول مستقیماً روی فاز گاز اثر می‌گذارد، سپس این اثر به‌واسطه‌ی مکانیزم انتقال حرارت جابه‌جایی بین دو فاز به محیط متخلخل اعمال می‌شود.

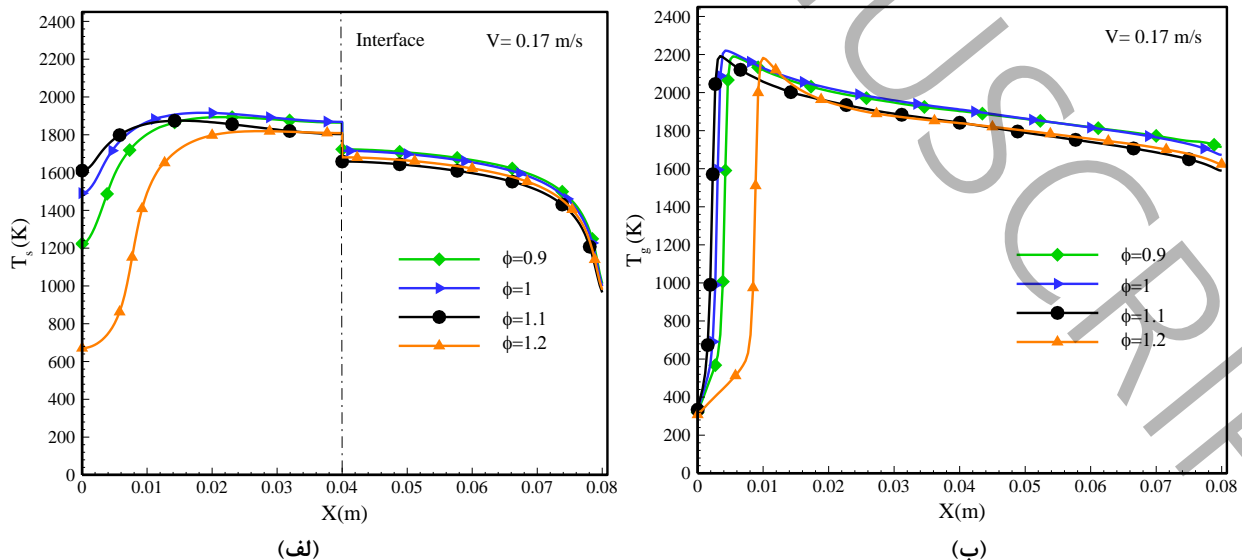
به همین دلیل ماتریس جامد از تغییر نسبت هم‌ارزی کم‌تر متأثر می‌گردد. عامل دیگر، بزرگ‌تر بودن ضریب هدایت محیط متخلخل، خصوصاً در ناحیه‌ی واکنش، نسبت به ضریب هدایت مخلوط گازها است. این امر منجر به یکنواختی بیش‌تر نمودار دمای فاز جامد می‌شود.



شکل ۷. نمودار بیشینه دمای فاز گاز و جامد در بازه نسبت هم ارزی $\phi = 0.7-1.2$

Fig. 7. Diagram of maximum gas and solid temperature phase over the equivalence ratio range of $\phi = 0.7-1.2$

در این بخش موقعیت ناحیه شعله و دمای فاز گاز و جامد شعله در نسبت هم ارزی های مختلف در بازه $0.7-1.2$ و درصد سوخت آمونیاک 80% و درصد تخلخل 0.8 در دو سرعت ورودی مخلوط سوخت و هوا، 0.17 متر بر ثانیه و 0.2 متر بر ثانیه بررسی شد. در شکل ۸ و ۹ نمودار دمای فاز گاز و جامد و موقعیت ناحیه شعله در سرعت ورودی 0.17 متر بر ثانیه و 0.2 متر بر ثانیه نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود در سرعت ورودی ثابت با افزایش نسبت هم ارزی تا 1.1 ، دمای فاز گاز افزایش و ناحیه شعله به سمت بالادست مشعل حرکت می کند ولی در نسبت هم ارزی 1.2 چون در ناحیه غنی سوخت قرار دارد و در این ناحیه کمبود اکسیژن وجود دارد به همین دلیل واکنش ناقص خواهد بود و دمای شعله کاهش می یابد، این رفتار در سرعت ورودی 0.2 متر بر ثانیه محسوس تر است. طبق معادله های انرژی در فاز گاز و جامد، این دو معادله به وسیله ضریب انتقال حرارت حجمی به یکدیگر ارتباط پیدا می کنند به همین دلیل رفتار فاز جامد نیز مشابه فاز گاز است. زمانی که شعله در نسبت هم ارزی 1.2 قرار دارد دمای فاز گاز و جامد و موقعیت ناحیه شعله نسبت به سایر نسبت هم ارزی ها در فاصله دورتری از ورودی مشعل شکل می گیرد، همان طور که مشاهده می شود با افزایش سرعت از 0.17 به 0.2 متر بر ثانیه، موقعیت ناحیه شعله در حالت کلی به سمت پایین دست حرکت می کند و همچنین با افزایش نسبت هم ارزی بیشتر از 1.1 ، مشاهده می شود که موقعیت ناحیه شعله در سرعت ورودی 0.2 متر بر ثانیه به نسبت سرعت ورودی 0.17 متر بر ثانیه به خروجی مشعل نزدیک تر است.



شکل ۸. نمودار موقعیت ناحیه واکنش شعله در نسبت هم ارزی مختلف و سرعت ورودی 0.17 متر بر ثانیه در الف) فاز گاز ب) فاز جامد

Fig. 8. Diagram of flame reaction zone position at different equivalence ratio and inlet velocity = 0.17 m/s in a) Gas phase b) Solid phase

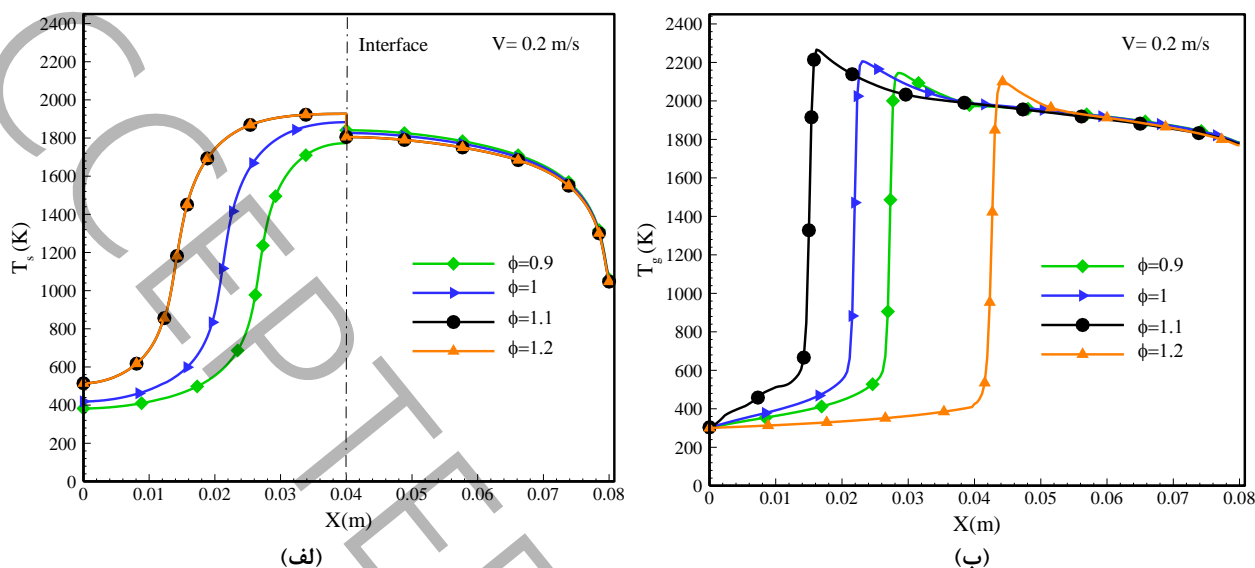
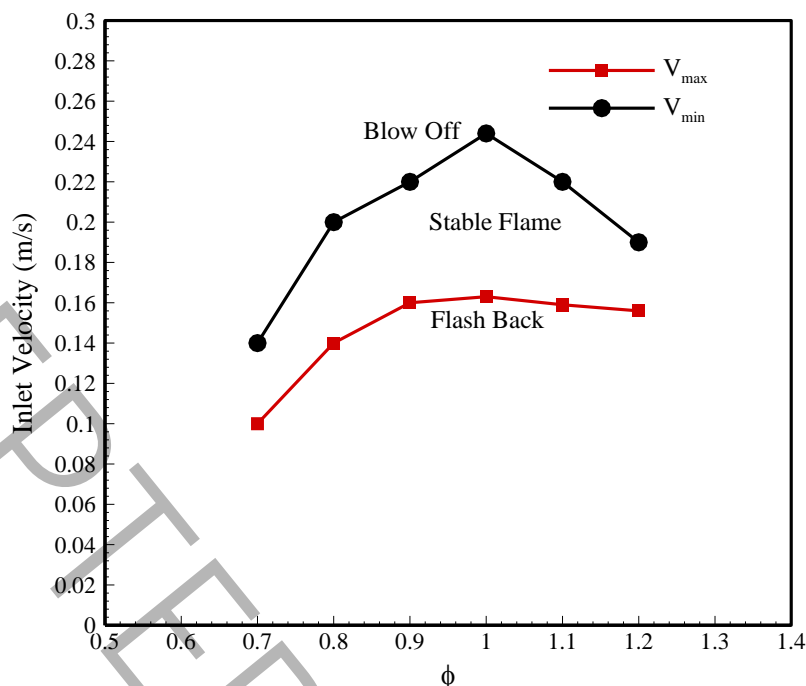


Fig. 9. Diagram of flame reaction zone position at different equivalence ratio and inlet velocity = 0.2 m/s in a) Gas phase b) Solid phase

شکل ۹. نمودار موقعیت ناحیه واکنش شعله در نسبت هم ارزی مختلف و سرعت ورودی ۰/۲ متر بر ثانیه در الف) فاز گاز ب) فاز جامد

۸-۲- حدود شعله‌وری مشعل در نسبت هم ارزی مختلف

در این بخش اثر سرعت ورودی مخلوط سوخت و هوا، یا به عبارتی توان حرارتی مشعل محیط متخلخل و همچنین نسبت هم‌ارزی بر حدود شعله‌وری سوخت آمونیاک-متان در بازه نسبت هم ارزی ۰/۷-۱/۲ و درصد سوخت آمونیاک ۰/۸۰ بررسی شد. بر همین اساس دو حد بالا و پایین حدود شعله‌وری تعریف می‌شود. حد بالای حدود شعله‌وری در یک نسبت هم‌ارزی ثابت به سرعتی گفته می‌شود که به ازای مقادیر بیشتر از آن، شعله در مرز خروجی مشعل محیط متخلخل تشکیل و یا به‌طور کلی از محفظه احتراق خارج شود. در این حالت سرعت جریان نسوخته بیشتر از سرعت شعله است. همچنین حد پایین حدود شعله‌وری به سرعت جریانی گفته می‌شود که تمام شعله یا بخشی از آن در ابتدای محیط متخلخل تشکیل شود. در این حالت، سرعت شعله بیشتر از سرعت جریان است و لذا شعله در نزدیک ورودی محیط متخلخل تشکیل می‌شود. شکل ۱۰ حدود پایین و بالای حدود شعله‌وری کمترین و بیشترین مقدار سرعت ورودی مشعل را برحسب نسبت هم ارزی نمایش می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود در هر نسبت هم ارزی، مقادیر حداقل و حداکثر سرعت ورودی وجود دارد که در محدوده‌ی بین این دو، شعله در آن ناحیه پایدار است و برای سرعت‌های ورودی کمتر و بیشتر از این محدوده به ترتیب پدیده‌ی برگشت شعله و پرش شعله اتفاق می‌افتد. نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد با افزایش نسبت هم‌ارزی تا ناحیه استوکیومتری، حداقل و حداکثر سرعت ورودی برای جلوگیری از برگشت شعله و پرش شعله افزایش می‌یابد. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش نسبت هم‌ارزی از ۰/۷ به ۱، حداقل سرعت ورودی برای حد پایین حدود شعله‌وری به ترتیب از ۰/۱ به ۰/۱۶۳ متر بر ثانیه یعنی معادل ۰/۶۳٪ افزایش می‌یابد و بعد از نسبت هم ارزی ۱ با کاهش سرعت سوزش این مقدار کاهش می‌یابد. همچنین حداکثر سرعت ورودی برای حد بالای حدود شعله‌وری، با افزایش نسبت هم ارزی از ۰/۷ به ۱ به ترتیب از ۰/۱۴ به ۰/۲۴۴ متر بر ثانیه یعنی معادل ۰/۵۷٪ افزایش می‌یابد و بعد از نسبت هم ارزی ۱ کاهش می‌یابد. نکته حائز اهمیت در شکل ۱۰ وابستگی بیشتر پرش شعله به نسبت هم‌ارزی است درحالی‌که برگشت شعله از ناحیه استوکیومتری به بعد با افزایش نسبت هم ارزی تغییر زیادی نکرده است. درنهایت می‌توان بیان داشت بیشترین محدوده‌ی حدود شعله‌وری شعله در بازه نسبت هم ارزی ۰/۹-۱ است.

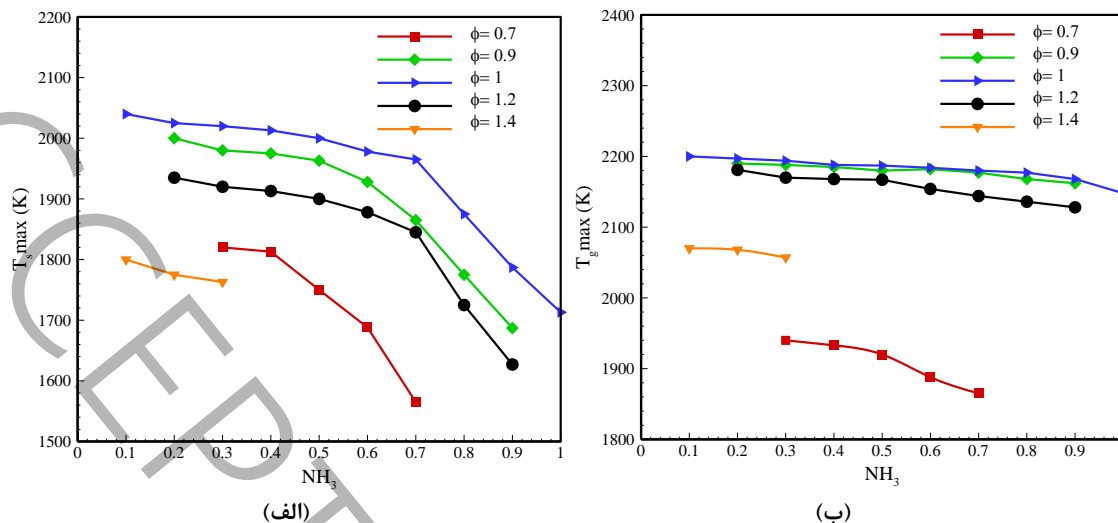


شکل ۱۰. حدود پایین و بالای حدود شعله‌وری شعله در سرعت ورودی و نسبت هم ارزی مختلف

Fig. 10. Upper and lower flammability limits of the flame at different inlet velocities and equivalence ratios

۳-۸- بررسی اثر تغییر درصد آمونیاک و نسبت هم ارزی

در این بخش به بررسی اثر تغییر درصد آمونیاک موجود در سوخت ورودی از بازه ۱۰۰٪-۱۰٪ و همچنین تغییر نسبت هم ارزی از بازه ۱/۴-۰/۷ بر روی بیشینه دمای فاز گاز و جامد و موقعیت ناحیه شعله پرداخته شده است. همان‌طور که در نمودار شکل ۱۱ برای بیشینه دمای فاز گاز مشاهده می‌شود در نسبت هم ارزی ثابت با افزایش درصد سوخت آمونیاک به مخلوط سوخت ورودی، دمای بیشینه فاز گاز کاهش می‌یابد دلیل این امر نرخ واکنش بالاتر (افزایش واکنش احتراق) سوخت متان نسبت به سوخت آمونیاک است، در واقع هرچه درصد سوخت آمونیاک افزایش می‌یابد از شدت نرخ واکنش سوخت کاهش می‌یابد لذا دمای بیشینه شعله نیز کاهش می‌یابد، از طرفی مشاهده می‌شود با افزایش نسبت هم ارزی تا نسبت هم ارزی ۱، دمای بیشینه فاز گاز نیز افزایش می‌یابد و بعد از آن یعنی در مخلوط سوخت و هوای غنی به دلیل کاهش اکسیژن موجود برای واکنش سوخت، شروع به کاهش می‌کند. زمانی که نسبت هم ارزی برابر ۱ است بازه استفاده از درصد سوخت آمونیاک به بالاترین مقدار خود می‌رسد و در نواحی نزدیک به حالت استوکیومتری نیز این بازه تا حدودی حفظ می‌شود و هرچه قدر از ناحیه استوکیومتری دورتر شود میزان استفاده از سوخت آمونیاک کاهش می‌یابد. در واقع بیشترین بازه استفاده از سوخت آمونیاک بین ۳۰٪-۱۰٪ مشاهده شد. همان‌طور که مشاهده می‌شود همانند دمای فاز گاز و به دلیل ارتباط بین فاز گاز و جامد که از طریق ضریب انتقال حرارت حجمی ایجاد می‌شود هرچه درصد سوخت آمونیاک افزایش می‌یابد دمای فاز جامد نیز کاهش می‌یابد و با افزایش نسبت هم ارزی از ۰/۷ تا ۱، بیشینه دمای فاز جامد نیز افزایش و بعد از آن یعنی در مخلوط سوخت و هوای غنی شروع به کاهش می‌کند.



شکل ۱۱. نمودار بیشینه دمای فاز الف) گاز ب) جامد در درصد سوخت آمونیاک و نسبت هم ارزی مختلف
Fig. 11. Diagram of maximum gas phase temperature a) gas b) solid in ammonia fuel percentage and different equivalence ratio

با توجه به نمودارهای بیشینه دمای فاز گاز و جامد می توان نتیجه گرفت که افزایش درصد سوخت آمونیاک به سوخت ورودی باعث کاهش پایداری شعله می شود (باعث می شود سرعت و نرخ سوزش سوخت کاهش یابد). از طرفی حدود شعله وری مشعل را می توان با درصد نسبت سوخت آمونیاک و نسبت هم ارزی کنترل کرد. با توجه به شکل ۱۱ مشخص شد که بیشترین بازه درصد استفاده از سوخت آمونیاک در ناحیه استوکیومتری است و بافاصله از این ناحیه، بازه درصد استفاده از سوخت آمونیاک نیز کاهش می یابد. در جدول ۲ اثر تغییر درصد سوخت آمونیاک و نسبت هم ارزی بر موقعیت ناحیه واکنش شعله در سرعت ورودی ۰/۲ متر بر ثانیه بررسی شده است. همان طور که مشاهده می شود در حالت کلی در نسبت هم ارزی ثابت، با افزایش درصد سوخت آمونیاک، به دلیل نرخ واکنش و سرعت پایین شعله آمونیاک، موقعیت ناحیه شعله به سمت پایین دست و به سمت خروجی مشعل حرکت می کند که در نسبت هم ارزی های ۰/۷ و ۱/۴ حرکت به سمت خروجی مشعل نسبت به حالت های دیگر بیشتر است که نشان می دهد بازه استفاده از آمونیاک در این نسبت هم ارزی ها کمتر است. از طرفی با افزایش درصد سوخت آمونیاک در تمام نسبت هم ارزی ها به بیشتر از ۰/۵۰٪، مشاهده شد که موقعیت ناحیه با سرعت بیشتری به سمت خروجی مشعل حرکت می کند به طوری که کمترین مقدار در نسبت هم ارزی ۰/۷ و درصد سوخت آمونیاک ۰/۷۰٪، موقعیت ناحیه شعله در ۵ سانتی متری از ورودی مشعل مشاهده شد. همچنین با افزایش نسبت هم ارزی تا ۱، بازه استفاده از درصد سوخت آمونیاک بیشتر و موقعیت ناحیه شعله تا بازه ۰/۶۰٪ سوخت آمونیاک در نزدیکی ورودی مشعل مشاهده شد که نشان می دهد بهتر از حالت های سوخت رقیق و غنی است. در نهایت می توان نتیجه گرفت، زمانی که مخلوط سوخت و هوا در حوالی مخلوط استوکیومتری باشد بازه درصد استفاده از سوخت آمونیاک بیشتر است.

جدول ۲. اثر تغییر درصد سوخت آمونیاک و نسبت هم ارزی بر موقعیت ناحیه شعله در سرعت ورودی ۰/۲ متر بر ثانیه
Table. 2. Effect of changes in ammonia fuel percentage and equivalence ratio on the flame zone position at an inlet velocity of 0.2 m/s

موقعیت ناحیه شعله در درصد سوخت آمونیاک مختلف (سانتی متر)										
نسبت هم ارزی	۱۰٪	۲۰٪	۳۰٪	۴۰٪	۵۰٪	۶۰٪	۷۰٪	۸۰٪	۹۰٪	۱۰۰٪

-	-	-	۵	۱/۵	۰/۳	۰/۱۳	۰/۱	-	-	۰/۷
-	۴/۷	۱/۹	۰/۳	۰/۱۵	۰/۱۲	۰/۱۱	۰/۱	۰/۱	-	۰/۹
۴/۸	۳/۹	۱/۵	۰/۲۷	۰/۱۲	۰/۱۱	۰/۱	۰/۱	۰/۱	۰/۱	۱
-	۳/۴	۲/۶	۲/۴	۰/۱	۰/۱	۰/۱	۰/۱	۰/۱	-	۱/۲
-	-	-	-	-	-	-	۰/۱۸	۰/۵	۰/۳	۱/۴

۹- نتیجه گیری

در مطالعه حاضر، شبیه سازی عددی احتراق پیش آمیخته سوخت آمونیاک- متان در محیط متخلخل به کمک نرم افزار فلوئنت انجام شد که هدف آن بررسی اثر پارامترهای نسبت هم ارزی، سرعت ورودی و تغییر هم زمان درصد سوخت آمونیاک و نسبت هم ارزی بر پارامترهای عملکردی شعله از جمله دمای فاز گاز و جامد و موقعیت ناحیه شعله و حدود شعله وری مشعل است. در این پژوهش برای اعتبار سنجی نتایج، از سینتیک شیمیایی ژو و همکاران با ۶۹ گونه و ۳۸۹ واکنش با نتایج تجربی روچا و همکاران استفاده شد که نتایج نمودار توزیع دمای فاز گاز و جامد تطابق قابل قبولی با نتایج تجربی داشت. در ادامه نتایج حاصل از مطالعه فوق به صورت خلاصه ارائه می شوند.

۱- با تغییر نسبت هم ارزی، در ناحیه ی واکنش بیشترین دمای فاز گاز در احتراق استوکیومتری اتفاق می افتد. هر اندازه که مخلوط سوخت و هوا از حالت استوکیومتری بیش تر فاصله می گیرد، انرژی آزاد شده از واکنش های شیمیایی کم تر و متعاقب آن دمای فاز گاز کاهش می یابد.

۲- با افزایش نسبت هم ارزی تا ۱/۱ و در سرعت های مختلف ورودی، موقعیت ناحیه شعله به سمت بالادست مشعل حرکت می کند و با افزایش نسبت هم ارزی بیشتر از ۱/۱، مشاهده می شود که ناحیه شعله به سمت پایین دست حرکت می کند.

۳- با افزایش نسبت هم ارزی از ۰/۷ به ۱ حداقل سرعت ورودی برای حد پایین حدود شعله وری به ترتیب از ۰/۱ به ۰/۱۶۳ متر بر ثانیه افزایش می یابد و بعد از نسبت هم ارزی ۱ با کاهش سرعت سوزش این مقدار کاهش می یابد. همچنین با افزایش نسبت هم ارزی از ۰/۷ به ۱ حداکثر سرعت ورودی برای حد بالای حدود شعله وری به ترتیب از ۰/۱۴ به ۰/۲۴۴ متر بر ثانیه افزایش می یابد و بعد از نسبت هم ارزی ۱ کاهش می یابد. در نهایت می توان بیان داشت بیشترین محدوده ی حدود شعله وری در بازه نسبت هم ارزی بین ۰/۹-۱ است.

۴- در نسبت هم ارزی ثابت با افزایش درصد سوخت آمونیاک به مخلوط سوخت ورودی، دمای بیشینه فاز گاز کاهش می یابد در واقع هر چقدر درصد سوخت آمونیاک افزایش می یابد از شدت نرخ واکنش سوخت کاهش می یابد لذا دمای بیشینه شعله نیز کاهش می یابد، از طرفی مشاهده شد با افزایش نسبت هم ارزی تا نسبت هم ارزی ۱، دمای بیشینه فاز گاز نیز افزایش می یابد و بعد از آن یعنی در مخلوط سوخت و هوای غنی به دلیل کاهش اکسیژن موجود برای واکنش سوخت، شروع به کاهش می کند.

۵- با افزایش نسبت هم ارزی تا ۱، بازه استفاده از سوخت آمونیاک بین ۱۰۰٪-۱۰٪ و کمترین بازه استفاده از سوخت آمونیاک در نسبت هم ارزی ۱/۴ بین ۳۰٪-۱۰٪ مشاهده شد. در واقع مشاهده می شود بیشترین بازه استفاده از آمونیاک زمانی اتفاق می افتد که در ناحیه استوکیومتری باشد.

۶- در حالت کلی در نسبت هم ارزی ثابت، با افزایش درصد سوخت آمونیاک، به دلیل نرخ واکنش و سرعت پایین شعله آمونیاک، موقعیت ناحیه شعله به سمت پایین دست و به سمت خروجی مشعل حرکت می کند.

۷- افزایش درصد سوخت آمونیاک در سوخت ورودی باعث کاهش حدود شعله وری شعله می شود (باعث می شود سرعت و نرخ سوزش سوخت کاهش یابد). از طرفی حدود شعله وری شعله را می توان با درصد نسبت سوخت آمونیاک و نسبت هم ارزی کنترل کرد.

۸- با افزایش درصد سوخت آمونیاک به بیشتر از ۵۰٪، مشاهده شد که موقعیت ناحیه شعله با سرعت بیشتری به سمت خروجی مشعل حرکت می کند به طوری که کمترین بازه حدود شعله وری در نسبت هم ارزی ۰/۷ و درصد سوخت آمونیاک ۷۰٪، مشعل مشاهده شد.

۱۰- فهرست علائم

\vec{u}	سرعت ذاتی سیال	Y	کسر جرمی
$(\nabla p)_p$	افت فشار ناشی از وجود محیط متخلخل	N	گونه ی شیمیایی
d_p	قطر متوسط فوم سرامیکی	Nu_v	ضریب ناسلت
ppc	چگالی حفره بر حسب واحد سانتی متر	e	ضریب صدور محیط متخلخل
c_p	ظرفیت گرمای ویژه سیال در فشار ثابت	σ	ثابت استفان- بولتزمن

علائم یونانی	ظرفیت گرمایی ویژه‌ی ماتریس جامد
تخلخل محیط	c_s
چگالی	دمای گاز T_g
ویسکوزیته	دمای جامد T_s
ضریب هدایت حرارتی سیال	دمای محیط T_{surr}
ضریب هدایت حرارتی مؤثر	ضریب انتقال حرارت حجمی H_v
ضریب هدایت حرارتی جامد	نرخ مولی تولید گونه k ام ω_k
ضریب تشعشع حرارتی	آنتالپی گونه k ام h_k
ضریب خاموشی	وزن مولکلی گونه k ام W_k
نسبت هم ارزی	دمای جامد T_s
	ضریب ناسلت Nu_v
	عدد رینولدز Re
	ثابت جهانی گازها R_u
	حجم ماده متخلخل a_v
	سرعت نفوذ گونه‌ی k ام V_k

۱۱- منابع و مراجع

- [1] W. S. Chai, Y. Bao, P. Jin, G. Tang, L. Zhou, A review on ammonia, ammonia-hydrogen and ammonia-methane fuels, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 147 (2021) 11254.
- [2] A. Yapicioglu, I. Dincer, A review on clean ammonia as a potential fuel for power generators, *Renewable and sustainable energy reviews*, 103 (2019) 96-108.
- [3] J. Shi, Y. Liu, M. Mao, J. Lv, Y. Wang, F. He, Experimental and numerical studies on the effect of packed bed length on CO and NOx emissions in a plane-parallel porous combustor, *Energy*, 181 (2019) 250-263.
- [4] C. S. Mørch, A Bjerre, M. P. Gøttrup, S. C. Sorenson, J. Schramm, Ammonia/hydrogen mixtures in an SI-engine: Engine performance and analysis of a proposed fuel system, *Fuel*, 90 (2011) 854-864.
- [5] A. Valera-Medina, Morris, S. Runyon, J. Pugh, D. G. Marsh, R. Beasley, P. Hughes, Ammonia, methane and hydrogen for gas turbines, *Energy Procedia*, 75 (2015) 118-123.
- [6] O. Kurata, N. Iki, T. Matsunuma, T. Inoue, T. Tsujimura, H. Furutani, H. Kobayashi, A. Hayakawa, Performances and emission characteristics of NH₃-air and NH₃-CH₄-air combustion gas-turbine power generations, *Proc. Combust. Inst*, 36 (2001) 3351-3359.
- [7] A. S. Singh, Y. Vijrumbana, V. M. Reddy, Experimental and computational (Chemical Kinetic + CFD) analyses of Self-Recuperative annular tubular porous burner for NH₃/CH₄-air NonPremixed combustion. *Chemical Engineering Journal*, 481(2024) 148439.
- [8] M. Bastani, S. Tabejamaat, H. Ashini, Experimental study of Ammonia-Methane mixture combustion in the micro gas turbine combustor. *Fuel and Combustion*, 3(2021) 120-138(in persian).
- [9] 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.
- [10] E. C. Okafor, Y. Naito, S. Colson, A. Ichikawa, T. Kudo, A. Hayakawa, H. Kobayashi, Experimental and numerical study of the laminar burning velocity of CH₄-NH₃-air premixed flames. *Combust, Flame*, 187 (2018) 185-198.
- [11] H. Xiao, A. Valera-Medina, P. J. Bowen, Study on premixed combustion characteristics of co-firing ammonia/methane fuels. *Energy*, 140 (2017) 125-135.
- [12] C. F. Ramos, R. C. Rocha, P. M. R. Oliveira, M. Costa, X. S. Bai, Experimental and kinetic modelling investigation on NO, CO and NH₃ emissions from NH₃/CH₄/air premixed flames, *Fuel*, 254 (2019) 115693.
- [13] H. Nozari, O. Tuncer, A. Karabeyoglu, Evaluation of ammonia-hydrogen-air combustion in SiC porous medium based burner, *Energy Procedia*, 142 (2017) 674-679.

- [14] C. Brackmann, V. A. Alekseev, B. Zhou, E. Nordström, P. E. Bengtsson, Z. Li, M. Aldén, A. A. Konnov, Structure of premixed ammonia + air flames at atmospheric pressure: Laser diagnostics and kinetic modeling, *Combustion and Flame*, 163 (2016) 370–38.
- [15] G. Vignat, T. Zirwes, E. R. Toro, K. Younes, E. Boigne, P. Muhunthan, L. Simitz, D. Trimis, M. Ihme, Experimental and numerical investigation of flame stabilization and pollutant formation in matrix stabilized ammonia-hydrogen combustion, *Combustion and Flame*, 250(2023) 112642.
- [16] D. Chen, J. Li, X. Li, L. Deng, Z. He, H. Huang, N. Kobayashi, Study on combustion characteristics of hydrogen addition on ammonia flame at a porous burner, *Energy*, 263(2023) 125613.
- [17] G. Wang, L. Huang, H. Tu, H. Zhou, X. Chen, J. Xu, Stable lean co-combustion of ammonia/methane with air in a porous burner, *Applied Thermal Engineering*, 248(2024) 123092.
- [18] C. Rodolfo, C. Rocha, Filipe Ramos, Mário Costa, X. S. Bai. Combustion of NH₃/CH₄/Air and NH₃/H₂/Air Mixtures in a Porous Burner: Experiments and Kinetic Modeling, *Energy & Fuels*, 33(12) (2019) 12767-12780.
- [19] S. M. Hashemi, P. Wang, C. Mao, K. Cheng, Y. Sun, Z. Yin, Combustion Performance of the Premixed Ammonia-Hydrogen-Air Flame in Porous Burner, *Combustion Science and Technology*, 196 (2023) 4121-4138.
- [20] S. M. Hashemi, P. Wang, C. Mao, K. Cheng, Y. Sun, Z. Yin, Experimental study on the pollutant emissions of premixed ammonia/methane/air flame within porous burner, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 238(2024) 4139-4136.
- [21] R. C. Catapan, A. A. M. Oliveira, M. Costa, Non-uniform velocity profile mechanism for flame stabilization in a porous radiant burner, *Experimental Thermal and Fluid Science*, 35 (2011) 172-179.
- [22] S. Ergun, Fluid flow through packed columns, *Chemical Engineering Progress*, 48(2) (1952) 89-94.
- [23] D. A. Nield, A. Bejan, *Convection in Porous Media*, Springer, 2006.
- [24] X. Fu, R. Vistanka, J. P. Gore, Measurement and correlation of volumetric heat transfer coefficient of cellular ceramics, *Experimental Thermal and Fluid Science*, 17 (1998) 285- 293.
- [25] X. Fu, *Modeling of A Submerged Flame Porous Burner/Radiant Heater*, Purdue University, 1997.
- [26] M. Farzaneh, M. Shafiey, R. Ebrahimi, M. Shams, Numerical investigation of premixed combustion in porous burner with integrated heat exchanger, *Heat and Mass Transfer*, 48 (2012) 1273-1283.
- [27] S. Gauthier, A. Nicolle, D. Baillis, Investigation of flame structure and nitrogen oxides formation in lean porous premixed combustion of natural gas/ hydrogen blends, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33 (2008) 4893- 4905.
- [28] L. Xu, Y. Chang, M. Treacy, Y. Zhou, M. Jia, X. S. Bai, A skeletal chemical kinetic mechanism for ammonia/n-heptane combustion, *Fuel*, 331 (2023) 125830.

Numerical study of flammability limits of premixed combustion of ammonia-methane mixture in a porous media burner

Mehdi Sepahvand, Seyed Abdolmehdi Hashemi *, Ali Arefmanesh

Department of Mechanical Engineering, University of Kashan, Kashan, Iran

ABSTRACT

This study numerically examines how equivalence ratio, inlet velocity, and ammonia-to-methane ratio in fuel impact flammability limits and flame temperature distribution in an ammonia-methane mixture within a porous burner. The research employed the finite volume method in Fluent 22 software with a chemical kinetic model featuring 69 species and 389 reactions. Results show that increasing the equivalence ratio to 1 increases peak temperatures in both gas and solid phases, followed by a decrease. At varying inlet velocities, an equivalence ratio up to 1.1 moves the flame zone upstream; beyond this, it shifts downstream. Furthermore, as the equivalence ratio increases from 0.7 to 1, the minimum inlet velocity for the lower flammability limit rises by 57% (from 0.1 to 0.163 m/s), and the maximum inlet velocity for the upper flammability limit rises by 63% (from 0.14 to 0.244 m/s). For a fixed equivalence ratio, increasing ammonia percentage lowers peak gas and solid temperatures. Additionally, the widest ammonia range occurs at an equivalence ratio of 1 (10% to 100%), whereas at an equivalence ratio of 1.4, the range narrows to 10%–30%.

KEYWORDS

Porous burner, Ammonia fuel, Flame stability, premixed combustion, equivalence ratio.

*Corresponding Author: Email: Hashemi@kashanu.ac.ir