



تأثیر نسبت هم‌ارزی هوا-سوخت بر فرآیند احتراق در کوره واحد آمونیاک شرکت پتروشیمی رازی

علیرضا دنه‌دزفولی^{۱*}، شیوا خمیسی^۲ و سیدسعید بحرینیان^۳

^۱ استادیار گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران
^۲ دانش‌آموخته کارشناسی‌ارشد گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران
^۳ دانشیار گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران
 مقاله مستقل، تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۰۷/۲۳؛ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۰/۰۵/۲۳؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۸/۱۳

چکیده

تأثیر نسبت هم‌ارزی سوخت به هوا بر فرآیند احتراق در کوره واحد آمونیاک شرکت پتروشیمی رازی در این مقاله مورد آنالیز عددی قرار گرفته است. هندسه سه‌بعدی کوره براساس فرض سوخت و هوای غیرپیش‌آمیخته مدل شده است. مدل‌سازی جریان دائم تراکم‌پذیر احتراق آشفته واکنشی با معادلات اساسی بقا و در نظر گرفتن اثرات انتقال حرارت هدایت، جابجایی تشعشع ارائه شده است. مکانیزم‌های زلدوویچ و فنیمور برای محاسبه انتشار NO_x استفاده شده‌اند. نتایج عددی با دقت ۹۹ درصد در مقایسه با داده‌های تجربی روی یک شبکه محاسباتی با 3165349 المان به دست آمده است. بررسی نتایج نشان داد که کاهش نسبت هم‌ارزی، باعث نزدیک شدن بیشینه دمای شعله به نازل سوخت ورودی و کاهش طول شعله می‌شود. دمای بالا در خروجی کوره به دلیل اختلاط بهتر جریان‌ها در نسبت‌های هم‌ارزی بزرگ ایجاد می‌شود. میزان تولید آلاینده NO_x در نسبت هم‌ارزی‌های 0.833 ، 0.714 و 0.625 به ترتیب 50.62 ، 53.23 و 56.2 درصد نسبت به حالت هوای نظری افزایش یافت.

کلمات کلیدی: احتراق؛ نسبت هم‌ارزی؛ کوره آمونیاک؛ شرکت پتروشیمی رازی.

Effect of Air-Fuel Equivalence Ratio on Combustion Process in Furnace of Razi Petrochemical Company's Ammonia Unit

A. Daneh-Dezfuli^{1,*}, Sh. Khamisi², S.S. Bahrainian³

¹ Asst. Prof., Dept. of Mech. Eng., Faculty of Engineering, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.
² M.Sc. Graduated, Dept. of Mech. Eng., Faculty of Engineering, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.
³ Assoc. Prof., Dept. of Mech. Eng., Faculty of Engineering, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

Abstract

Effect of fuel-to-air equivalence ratio on combustion process in the furnace of Razi petrochemical company's ammonia unit is numerically analyzed in this paper. Three-dimensional geometry of the furnace has been modelled based on non-premixed fuel and air assumption. Modeling of steady-state compressible reactive-turbulent combustion is presented by the basic conservation equations considering the effects of conductive, convective and radiative heat transfers. Zeldovich and Fenimore mechanisms have been employed to account thermal and prompt NO_x emission. Numerical results obtained with 99% accuracy compared to experimental data on a computational grid possessing 3165349 elements. Results showed that reduction of equivalence ratio causes the maximum flame temperature to approach inlet fuel nozzle and decrease flame length. High temperature at the furnace outlet is caused by better mixing of flows in great equivalence ratios. The production of NO_x pollutants in the equivalence ratios of 0.833, 0.714 and 0.625 increases by 50.62, 53.23 and 56.2 percentages respectively with respect to the stoichiometric state.

Keywords: Combustion; Equivalence Ratio; Ammonia Furnace; Razi Petrochemical Company.

۱- مقدمه

امروزه نزدیک به ۸۰ درصد از انرژی تولیدی جهان از احتراق سوخت‌های گازی نظیر متان، اتان و اتیلن به دست می‌آید [۱]. مقررات مربوط به کنترل و کاهش آلاینده‌های حاصل از احتراق باعث ایجاد تصمیم جدی در ارائه سیستم‌های احتراق کارآمدتر شده است [۲]. شبیه‌سازی عددی کوره‌های احتراق یکی از تکنیک‌های کاربردی جهت رسیدن محصول‌ها به شرایط فرآیندی موردنظر، کاهش مصرف سوخت و انرژی، بهبود کارایی حرارتی و کاهش آلودگی‌ها است [۳-۴]. در این مقاله، به شبیه‌سازی انتقال حرارت در کوره عمودی واحد آمونیاک پتروشیمی رازی پرداخته می‌شود.

مطالعات گسترده‌ای جهت بررسی تجربی و عددی عملکرد کوره‌های احتراق انجام شده است. استفاده از روش‌های مختلف برای مدل‌سازی آلاینده اکسیدهای نیتروژن و مقایسه با نتایج تجربی توسط مانچینی و همکاران گزارش شد [۵]. اگرچه تطابق مناسبی در نواحی جت سوخت مشاهده نشد، اما در سایر نواحی، مقادیر پیش‌بینی‌شده برای گونه‌ها و مقادیر آلاینده مناسب بود. احتراق جت پروپان در جریان پیش‌گرم‌شده و رقیق اکسیژن با هدف بررسی اثر دمای سوخت بر جریان به صورت عددی توسط یانگ و بلازیاک مورد مطالعه قرار گرفت [۶]. نتایج عددی مدل‌سازی با روش برهم‌کنشی شکست گردابه و تابع چگالی احتمال کسر مخلوط با مقادیر تجربی مقایسه شده است. مکانیزم‌های دمایی و سریع (Prompt) نیز برای محاسبه اکسیدهای نیتروژن مورد استفاده قرار گرفته شد. نتایج نشان داد که این روش در تخمین شکل شعله و توزیع دمایی مناسب است. افزایش ناحیه شعله با کاهش مقدار اکسیژن و کاهش اکسیدنیتریک با افزایش دمای ورودی سوخت از دیگر نتایج این بررسی بود. ووتالورو و ووتالورو اثر هوای اضافی بر نحوه کارکرد کوره را شبیه‌سازی عددی نمودند [۷]. فرآیند احتراق به صورت غیرپیش‌آمیخته در نظر گرفته شده است. مقدار دما داخل کوره با افزایش درصد هوای اضافی افزایش یافت. این مسئله می‌تواند تشکیل دوده در بخش‌های مختلف کوره را به همراه داشته باشد. دی و همکاران سیستم احتراق شعله هم‌محور را حل عددی

کردند [۸]. اثر روش مدل‌سازی برهم‌کنش آشفته‌گی و احتراق در تعامل با روش‌های دو مرحله‌ای و به کارگیری مکانیزم‌های واکنشی اسکلتی با درصد غلظت متفاوت اکسیژن بررسی شد. مقادیر سرعت متوسط و انرژی جنبشی آشفته‌گی با روش‌های مختلف آشفته‌گی به خوبی پیش‌بینی شد؛ همچنین این مدل‌سازی مقادیر کم‌تری را برای زمان شروع احتراق پیش‌بینی کرد. یاپاچی و همکاران تأثیر نسبت‌های مختلف هم‌ارزی هوا-سوخت و همچنین دبی جرمی سوخت را بر شبیه‌سازی عددی فرآیند احتراق متان-هوا در یک مشعل مطالعه کردند. خروجی‌ها نشان دادند که بیشترین تغییرات گرادیان دما در امتداد خط مرکزی مشعل رخ می‌دهد [۹]. ساریو و همکاران احتراق نفت سنگین در یک کوره استوانه‌ای آزمایشگاهی را مدل‌سازی کردند. نتیجه‌گیری شد که نتایج نه تنها به انتخاب مدل آشفته‌گی، بلکه به بسیاری از مفروضات دیگر مدل‌سازی مانند مدل‌های شیمی و احتراق، روش گسسته‌سازی عددی و تعریف دقیق شرایط مرزی بستگی دارند. با این حال، تعیین مقدار تأثیر هر یک از این مفروضات بر پیش‌بینی‌های نهایی دشوار است [۱۰]. ایلورف و سارا تأثیر هوای اضافی بر دینامیک احتراق در یک کوره عمودی را بررسی کردند. نشان داده شده است که دینامیک سیالات محاسباتی می‌تواند به عنوان ابزاری قدرتمند برای پیش‌بینی مشخصات احتراق استفاده شود [۱۱]. تو و همکاران مطالعه عددی احتراق پروپان در داخل یک کوره استوانه‌ای در مقیاس آزمایشگاهی را ارائه دادند. نتیجه شده است که مدل آشفته‌گی $k-\epsilon$ استاندارد توانایی بهتری نسبت به دیگر مدل‌ها در شبیه‌سازی‌های احتراق دارد [۱۲]. مطالعه عباسی و همکاران در ارتباط با مشخصات جریان در یک محفظه احتراق پاشش مستقیم نشان داد که مدل آشفته‌گی تنش رینولدز در مقایسه با مدل $k-\epsilon$ Realizable خطای محاسباتی کمتری دارد [۱۳].

موسوی ترشیزی و همکاران اثر هوای اولیه مشعل نیروگاه شازند بر شکل و محل شعله را مورد مطالعه قرار دادند [۱۴]. این مطالعه بر اساس ۸ درصد هوای اضافی برای احتراق سوخت گازی و در نظر گرفتن احتراق به صورت غیرپیش‌آمیخته بود. اثر پدیده‌هایی نظیر چرخش جریان مورد بررسی قرار نگرفت که موجب ورود خطای

مجتمع صنعتی فولاد اسفراین را انجام دادند. نتایج بررسی نشان داده است که میزان گرمای تولیدی با افزایش طول اختلاط به طور ناچیزی کاهش پیدا می‌کند [۲۱]. میرباقری و همکاران تاثیر توان مشعل شعله تخت بر ایجاد توزیع دمای یکنواخت در کوره‌های کراکینگ را به صورت عددی شبیه‌سازی کردند. نشان داده شده است که افزایش مومنوم جریان در ورودی مشعل‌ها، باعث افزایش توان حرارتی مشعل‌ها خواهد شد [۲۲].

شبیه‌سازی عملیات احتراق در کوره پیش‌گرم واحد آمونیاک شرکت پتروشیمی رازی تا پیش از این انجام نشده است. هدف مقاله حاضر، ارزیابی تاثیر نسبت هم‌آرزی هوا به سوخت بر عملکرد احتراق واکنشی آشفته در این کوره است. این کوره به شکل استوانه عمودی دارای یک کویل با هندسه نامتقارن است. بنابراین به صورت سه‌بعدی شبیه‌سازی می‌شود. فرآیند احتراق بر مبنای انتقال حرارت‌های هدایت، جابجایی و تشعشع در نظر گرفته شده است. محصولات احتراق شامل دی‌اکسیدکربن، نیتروژن، بخار آب و آلاینده‌ها است. تولید آلاینده‌ها با مکانیزم‌های دمایی و سریع مدل شده است. سیال درون کویل بخار آمونیاک است. سوخت و هوا به صورت غیرپیش‌آمیخته وارد کوره می‌شوند.

۲- مدل‌سازی هندسی

اجزای تشکیل‌دهنده فیزیک مساله شامل کوره، کویل مارپیچ و مشعل است. سوخت و هوا از پایین کوره وارد می‌شوند. هندسه کوره در ماژول مدل‌سازی نرم‌افزار انسیس نسخه ۲۰۱۹ تهیه شده است. نمایی از کوره به همراه نقشه آن در شکل ۱ نشان داده شده است.

مشخصات اجزای تشکیل‌دهنده کوره به همراه اندازه آنها در جدول ۱ خلاصه شده‌اند. جهت مدل‌سازی هندسی مساله، ابتدا مدل کویل همراه با در نظر گرفتن ضخامت دیواره آن طراحی شده است. هندسه کویل در شکل ۲-الف نمایش داده شده است. سپس، هندسه کوره طراحی شده است تا مدل نهایی به دست آید. سطوح ورودی هوا و متان در پایین کوره مدل شده است. در شکل ۲-ب مدل نهایی طراحی‌شده کوره نمایش داده شده است.

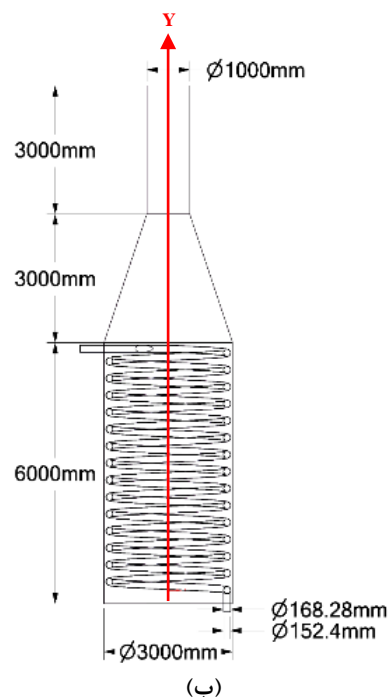
زیادی در نتایج شد. سهرابی‌کاشانی تاثیر نسبت هم‌آرزی هوا بر راندمان بویلر در نیروگاه‌های شهید منتظری اصفهان، زرگان اهواز و بندرعباس مقایسه کرده است [۱۵]. نتایج نشان داد که کارکرد بهینه بویلر به ازای نسبت‌های هم‌آرزی متفاوت از مشخصات اشاره شده در مدارک طراحی سازنده فاصله می‌گیرد. جلیلی‌مهر و همکاران تاثیر افزایش دمای گاز ورودی بر تشکیل دوده و تابش درخشانی ناشی از آن را مورد ارزیابی قرار دادند [۱۶]. پیشگرم ساختن سوخت ورودی به دلیل افزایش سهم تابش درخشانی، سبب افزایش راندمان نسبت به حالت بدون پیش‌گرمایش سوخت می‌شود. شریعتی و ثقه‌الاسلامی با هدف کاهش آلاینده اکسید نیتروژن به شبیه‌سازی دوبعدی احتراق پیش‌آمیخته متان و هوا در یک مشعل با محیط متخلخل پرداختند [۱۷]. خروجی این شبیه‌سازی به ارائه یک هندسه جدید برای مشعل شد. کیانی و همکاران به برآورد تاثیر دو پارامتر زاویه بین دو مشعل و پیش‌گرم کردن هوا و سوخت پرداختند [۱۸]. نتایج نشان داده که این دو پارامتر اثر مستقیم بر دمای بیشینه شعله و اکسید نیتروژن تولیدشده دارند. حشمتی و میرساجدی به بررسی آزمایشگاهی اثر تغییرات طول نازل مشعل بر مشخصه‌های احتراقی شعله پیش‌آمیخته چرخشی پرداختند. نتایج نشان دادند که با افزایش نسبت هم‌آرزی، شکل شعله از حالت پایدار کاسه‌ای شکل معلق به سمت یک شعله گردابه‌ای شکل متصل پیش می‌رود. این تغییر حالت طی یک فرآیند گذار انجام می‌شود و شکل شعله در طی چند گام تغییر کرده تا از حالت پایدار معلق به حالت متصل تبدیل شود؛ همچنین میزان آلاینده اکسیدهای نیتروژن دارای رابطه افزایشی با نسبت هم‌آرزی هستند [۱۹]. زرگرباشی و همکاران به بررسی تجربی اثر مشخصه‌های جریان ورودی و طول محفظه بر دینامیک شعله پیش‌آمیخته جزبی در راکتورهای ابعاد مزو استوانه‌ای شکل با قطر ثابت و طول‌های مختلف پرداختند. بر این اساس گزارش شده است که دینامیک شعله به ترتیب از تغییرات نسبت اختلاط، طول راکتور، دبی حجمی اکسیژن و نهایتاً دبی حجمی سوخت اثر می‌پذیرد که باعث تغییرات در سرعت جریان ورودی و نسبت هم‌آرزی می‌گردد [۲۰]. حاتمی و قلی‌پور مطالعه تجربی و بهینه‌سازی عددی پارامترهای هندسی مشعل در کوره پیش‌گرم خط پرس

جدول ۱- مشخصات اجزای کوره واحد آمونیاک

مشخصه	اندازه (متر)
<u>کوره</u>	
قطر ورودی گاز متان	۰/۱
قطر ورودی هوا	۰/۲۳
ارتفاع کلی کوره	۱۲
قطر قسمت گازهای خروجی	۱
ارتفاع قسمت گازهای خروجی	۳
<u>کویل مارپیچ</u>	
قطر داخلی مقطع کویل	۰/۱۵۲۴
قطر خارجی مقطع کویل	۰/۱۶۸۲۸
تعداد مارپیچ	۱۴
قطر مارپیچ	۲/۷
طول کلی کویل	۱۲۴/۹۷
<u>مشعل</u>	
قطر نازل سوخت	۰/۱
قطر هیدرولیکی نازل هوا	۰/۲۳



(الف)



(ب)

شکل ۱- کوره واحد آمونیاک پتروشیمی رازی (الف) هندسی واقعی و (ب) نقشه کروکی

۳- مدل سازی ریاضی

جریان درون کوره به صورت آشفته و واکنشی است؛ بنابراین لازم است تا علاوه بر میدان جریان، روابط واکنش گونه‌های شیمیایی نیز بیان شوند.

۳-۱- معادلات بقا

معادله بقای جرم حاکم بر جریان گاز دائم سه‌بعدی تراکم-پذیر آشفته را براساس فرمولاسیون انتقال گونه‌ها می‌توان به صورت رابطه (۱) بیان نمود.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_i') = - \frac{\partial}{\partial x_i} J_{i',i} + R_i' \quad (1)$$

که در آن، x_i معرف محورهای مختصات در جهات x, y, z که در آن، u_i میدان سرعت، ρ چگالی مخلوط، Y_i' کسر جرمی گونه i'

$R_{i'}$ نرخ تولید و مصرف گونه i' در واکنش شیمیایی و $J_{i',i}$ جمله پخش جرم است که برای جریان آشفته به صورت رابطه (۲) بیان می‌شود [۹].

$$J_{i',i} = - \left(\rho D_{i',m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Y_{i'}}{\partial x_i} - D_{T,i'} \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (2)$$

که در آن، μ_t لزجت آشفتگی است. Sc_t عدد اشمیت موثر بوده که برای جریان آشفته برابر 0.7 در نظر گرفته می‌شود. T دما و $D_{T,i'}$ ضریب پخش دمایی است. $D_{i',m}$ ضریب پخش گونه i' در مخلوط m بوده و بفرم زیر است [۹].

$$D_{i',m} = \frac{1 - X_{i'}}{\sum_{j',j' \neq i'} X_{i'}/D_{i',j'}} \quad (3)$$

که در آن، $X_{i'}$ کسر مولی گونه i' است. $D_{i',j'}$ ضریب پخش دوتایی گونه i' در گونه j' است. معادله مومنتوم برای چنین جریانی عبارت است از [۲۳].

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = \frac{\partial (\tau_{ij})_e}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (4)$$

که تانسور تنش برشی موثر، $(\tau_{ij})_e$ در آن عبارت است از

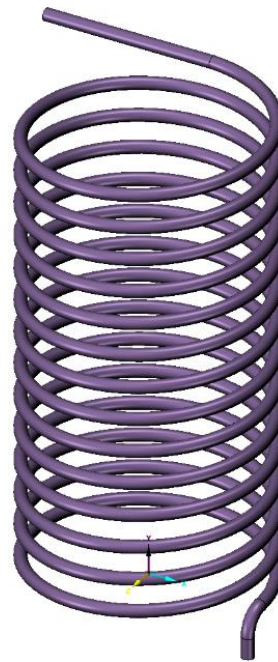
$$(\tau_{ij})_e = \mu_e \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu_e \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \quad (5)$$

که در آن p فشار است. پارامتر لزجت موثر، μ_e برابر با مجموع لزجت مولکولی μ و لزجت آشفتگی μ_t است. لزجت آشفتگی بر حسب انرژی جنبشی آشفتگی، k و نرخ اضمحلال آن، ε به صورت زیر محاسبه می‌شود.

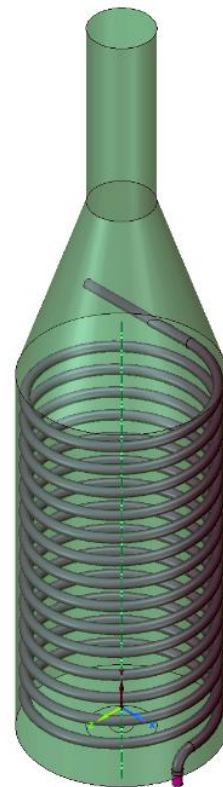
$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (6)$$

مقدار ثابت C_μ در معادله فوق برابر 0.09 است. مقادیر k و ε از حل معادلات مدل آشفتگی به دست می‌آیند. معادله انرژی جریان کوره به فرم رابطه (۷) نوشته می‌شود [۹] که در آن، $J_{j'}$ شار پخش گونه j' و S_h گرمای واکنش شیمیایی است. مقدار انرژی E از رابطه (۸) به دست می‌آید. مقدار آنتالپی مخلوط، h با رابطه (۹) محاسبه می‌شود که در آن، $h_{j'}$ آنتالپی گونه j' است که به شکل رابطه (۱۰) است.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} [u_i (\rho E + p)] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\lambda_e \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{j'} h_{j'} J_{j'} + u_j (\tau_{ij})_e \right] + S_h \quad (7)$$



(الف)



(ب)

شکل ۲- مدل طراحی شده به کمک کامپیوتر (الف) هندسه کوئل و (ب) هندسه نهایی کوره

۳-۳- مدل سازی جریان آشفته‌گی

در غیاب اثرات نیروهای شناوری، معادلات انتقال انرژی جنبشی آشفته‌گی و نرخ اضمحلال آن براساس مدل $k-\varepsilon$ استاندارد به فرم زیر هستند [۲۴].

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \rho \varepsilon \quad (19)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_1 \frac{\varepsilon}{k} G_k - C_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (20)$$

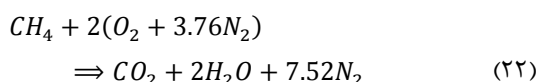
که در آن،

$$G_k = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (21)$$

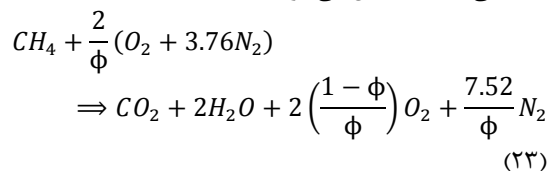
مقادیر ثابت C_1 ، C_2 ، σ_k و σ_ε در معادلات فوق به ترتیب برابر با ۱/۴۴، ۱/۹۲، ۱/۱۰ و ۱/۳ هستند.

۳-۴- احتراق سوخت و هوا

سوخت شامل متان و هوا به صورت ترکیب نیتروژن و اکسیژن در نظر گرفته شده است. به ازای یک مول سوخت متان برای اکسیداسیون با هوای نظری (تئوری)، رابطه واکنش شیمیایی احتراق کامل به صورت رابطه (۲۲) است [۲۵].



گاهی مقدار هوای موجود برای احتراق بیش از مقدار هوای نظری است. در این حالت یک مخلوط رقیق با واکنش شیمیایی (۲۳) تشکیل می‌شود [۹].



که در آن، ϕ نسبت هم‌ارزی هوا-سوخت بوده و به صورت نسبت دبی جرمی هوا به سوخت تئوری به ترتیب با مقدار ۰/۹۶ به ۰/۵۵۷ کیلوگرم بر ثانیه تقسیم بر این نسبت در حالت واقعی تعریف می‌گردد [۹]. در یک مخلوط رقیق، $0 < \phi \leq 1$ است.

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{u_i^2}{2} \quad (8)$$

$$h = \sum_{j'} m_{j'} h_{j'} \quad (9)$$

$$h_{j'} = \int_{T_{ref}}^T C_{p,j'} dT \quad (10)$$

که در آن، C_p ضریب گرمای ویژه در فشار ثابت و T_{ref} دمای مرجع است. λ_e ضریب هدایت حرارتی موثر است که به صورت زیر برآورد می‌شود.

$$\lambda_e = \alpha C_p \mu_e \quad (11)$$

α معکوس عددی پرانتل است که براساس فرمول تحلیلی زیر به دست می‌آید [۹].

$$\frac{\alpha - 1.3929}{\alpha_0 - 1.3929} \Big|^{0.6321} \frac{\alpha - 2.3929}{\alpha_0 - 2.3929} \Big|^{0.3679} = \frac{\mu}{\mu_e} \quad (12)$$

که در آن، عکس عدد پرانتل در شرایط دمای مرجع، α_0 به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$\alpha_0 = \frac{\lambda}{\mu C_p} \quad (13)$$

۳-۲- مشخصات ترمودینامیکی مخلوط

چگالی، لزجت، ضریب گرمای ویژه و هدایت حرارتی مخلوط براساس خواص گونه‌ها در مخلوط با توجه به قانون اختلاط گاز ایده‌آل به فرم زیر محاسبه می‌شوند [۹].

$$\rho = \frac{p_{op} + p}{RT \sum_{i'} \frac{Y_{i'}}{M_{i'}}} \quad (14)$$

$$C_p = \sum_{i'} Y_{i'} C_{p,i'} \quad (15)$$

$$\lambda = \sum_{i'} \frac{X_{i'} \lambda_{i'}}{\sum_{j'} X_{j'} \phi_{i',j'}} \quad (16)$$

$$\mu = \sum_{i'} \frac{X_{i'} \mu_{i'}}{\sum_{j'} X_{j'} \phi_{i',j'}} \quad (17)$$

که در آن، R ثابت جهانی گازها و M_i جرم مولکولی گونه i' است. p_{op} فشار عملکردی و پارامتر $\phi_{i',j'}$ عبارت است از:

$$\phi_{i',j'} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_{i'}}{\mu_{j'}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_{j'}}{M_{i'}} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2}{\left[8 \left(1 + \frac{M_{i'}}{M_{j'}} \right) \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (18)$$

۳-۷- مدل سازی نرخ تولید و مصرف گونه‌ها

از مدل اتلاف گردابی به منظور محاسبه نرخ تولید و مصرف گونه‌ها در معادله جرم استفاده شده است. خروجی این مدل به عنوان جمله چشمه در معادله (۱) استفاده می‌شود. مقدار منبع گونه i' در N_R واکنش به صورت زیر محاسبه می‌شود [۹].

$$R_{i't} = M_{i't} \sum_{k=1}^{N_R} R_{i',k} \quad (27)$$

که در آن، $R_{i',k}$ نرخ مولی تولید و مصرف گونه i' در واکنش k ام است.

۴- فرآیند شبیه‌سازی عددی

فرآیند شبیه‌سازی عددی احتراق در کوره واحد آمونیاک پتروشیمی رازی با استفاده از نرم‌افزار انسیس فلونت انجام شده است. جنس کوئل ماریچ از فولاد با خواص جدول ۲ در نظر گرفته شده است.

مطابق با شکل ۳ و براساس شرایط عملیاتی واقعی کوره، برای ورودی کوئل از شرط مرزی دبی جرمی ورودی برابر با ۲/۰۵ کیلوگرم بر ثانیه برای آمونیاک در دمای ۵۲۴/۸۲ کلون استفاده شده است. به دلیل در دسترس نبودن اطلاعات فشار در خروجی کوئل، از شرط مرزی دبی جرمی خروجی آمونیاک استفاده شده است. سوخت با دبی ۰/۰۵۵۷ کیلوگرم بر ثانیه و هوا با نسبت هم‌آرزی ۰/۸۳۳ معادل ۱/۱۵ کیلوگرم بر ثانیه هر دو در دمای ۳۰۰ کلون وارد کوره می‌شوند. برای خروجی کوره از شرط مرزی فشار خروجی در اتمسفر استفاده شده است. دیواره‌های کوره در تماس با هوا می‌باشند؛ بنابراین از شرط مرزی همرفت برای دیواره‌های کوره استفاده شده است. برای سطح تماس آمونیاک و دیواره داخلی کوئل و سطح تماس دیواره خارجی کوئل و کوره نیز از شرط مرزی کوئل استفاده شده است. روش پادباسو مرتبه دو جهت محاسبه شارهای روش حجم محدود انتخاب شده است.

جدول ۲- خواص فولاد کوئل ماریچ کوره

ρ (kg/m ³)	C_p (J/kg.K)	λ (W/m.K)
۸۰۳۰	۵۰۲/۴۸	۱۶/۲۷

عکس نسبت هم‌آرزی بیانگر درصد هوای اضافی است. انرژی حاصل از واکنش شیمیایی به معادله انرژی به عنوان جمله چشمه اضافه می‌شود.

۳-۵- مدل تشعشع

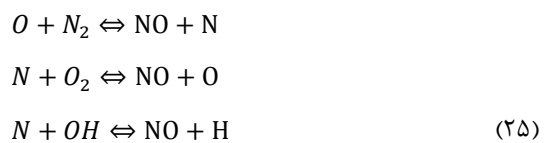
از مدل مختصات گسسته برای محاسبه اثرات انتقال حرارت تشعشعی در کوره استفاده شده است [۲۶]. رابطه این مدل به صورت (۲۴) است.

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} + (a + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega' \quad (24)$$

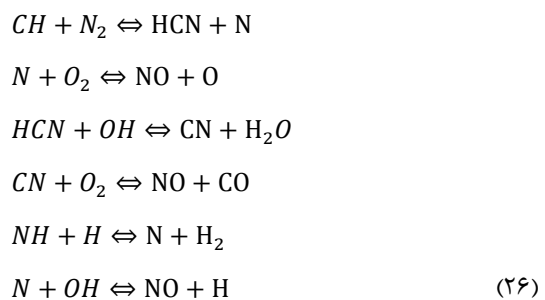
که در آن، r بردار مکان، s بردار پراکندگی، I شدت تشعشع، a ضریب جذب، σ_s ضریب پراکندگی، n ضریب شکست، s' بردار راستای پراکندگی، ϕ تابع فاز، Ω' زاویه فضایی و σ ثابت استفان-بولتزمن است.

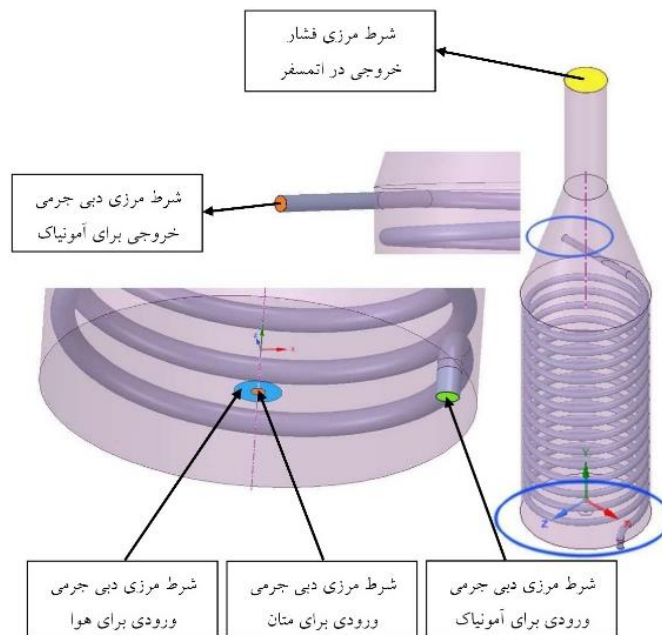
۳-۶- مکانیزم تولید آلاینده‌ها

در احتراق دما بالا، نیتروژن هوا امکان واکنش با اکسیژن را پیدا می‌کند و در نتیجه اکسیدهای نیتروژن شکل می‌گیرند که این فرآیند با مکانیزم دمایی زلدوویچ به صورت زیر مدل-سازی می‌شود [۲۷].

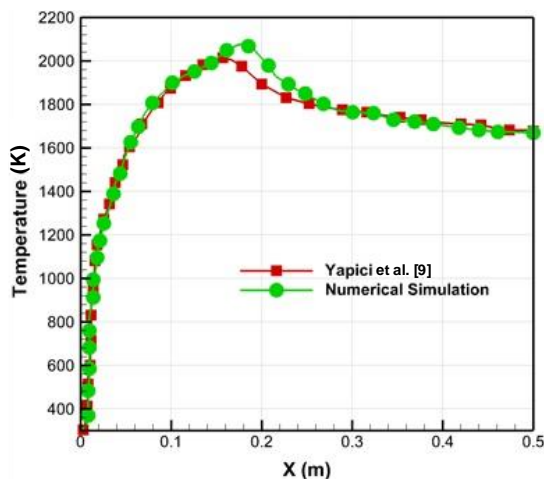


علاوه بر این، اگر فرصت کافی به سوخت و هوا برای اشتعال مناسب داده نشود، این شرایط می‌تواند منجر به تشکیل اکسیدهای نیتروژن گردد که با مکانیزم سریع فنیمور به صورت زیر مدل می‌شود [۲۸].





شکل ۳- جانمایی شرایط مرزی



شکل ۴- نتایج توزیع دما مطالعه حاضر روی محور مرکزی

کوره مدل یاپچی و همکاران [۹]

برای اطمینان از عدم وابستگی نتایج حل عددی به شبکه محاسباتی، در شکل ۵ تغییرات دمای خروجی کوره برای ۴ شبکه تولیدشده با تعداد المان‌های متفاوت نمایش داده شده است. از مطالعه شکل ۵ و جدول ۴ مشخص می‌شود که با حل عددی شبکه‌های محاسباتی سوم و چهارم، دمای خروجی کوره بسیار نزدیک به هم است و جواب‌ها ۰/۶ درصد تفاوت دارند؛ بنابراین شبکه شماره ۳ با تعداد المان ۳۱۶۵۳۴۹

همگرایی معادلات مساله بر اساس روش تکرار شبه‌گذرا با زمان تنظیم شده است. ضرایب زیر تخفیف در صورت عدم همگرایی به روزرسانی شده‌اند. در جدول ۳ ضرایب زیر تخفیف نهایی برای حل عددی گنجانده شده است. در صورت عدم همگرایی مساله، معادله تشعشع در تکرارهای اولیه غیرفعال می‌شود. پس از آنکه حل عددی به پایداری رسید، معادله تشعشع فعال می‌شود. سپس تکرارها تا رسیدن مساله به همگرایی ادامه می‌یابد. در نهایت پس از آن که مساله به همگرایی رسید، معادله‌های پیش‌بینی‌کننده NO_x فعال می‌شوند و مجدد تکرارها تا رسیدن حل به همگرایی ادامه می‌یابند. دقت روش عددی برای حل معادله پیوستگی 10^{-3} ، برای معادله انرژی و تشعشع 10^{-5} و برای سایر معادلات 10^{-4} در نظر گرفته شده است.

۵- نتایج عددی و بحث

در ابتدا جهت تایید روش حل عددی، محل بیشینه دمای شعله به دست آمده از حل عددی با نتایج کوره مدل یاپچی و همکاران [۹] مقایسه شده است. در شکل ۴ نتایج شبیه‌سازی مطالعه حاضر و مدل یاپچی و همکاران آورده شده است. حداکثر خطای حل عددی با مدل یاپچی و همکاران ۳/۷۱ درصد به دست آمده است.

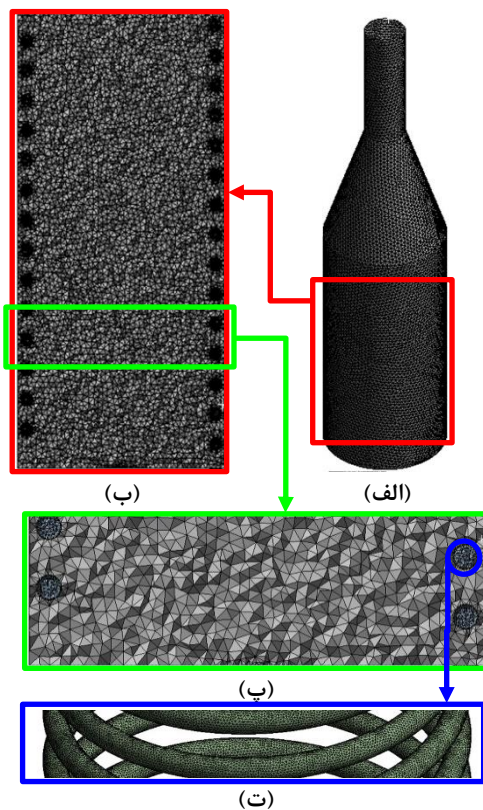
یک درصدی نشان از دقت ۹۹ درصدی فرآیند و نتایج شبیه سازی حل عددی دارد. بر اساس این دقت، کانتورهای دما، سرعت، چگالی و کسر جرمی گونه ها در شکل ۷ ارائه شده است.

در ادامه به ارائه نتایج تاثیر نسبت های هم آری ۱، ۰/۸۳۳، ۰/۷۱۴ و ۰/۶۲۵ پرداخته شده است که به ترتیب معادل میزان هوای اضافی صفر، ۲۰، ۴۰ و ۶۰ درصد است. دبی جرمی هوای ورودی به کوره برای این نسبت های هم آری به ترتیب برابر با ۰/۹۶، ۱/۱۵، ۱/۳۵ و ۱/۵۴ کیلوگرم

جدول ۴- مقایسه مقدار دمای خروجی کویل در

شبیه سازی عددی با داده های تجربی

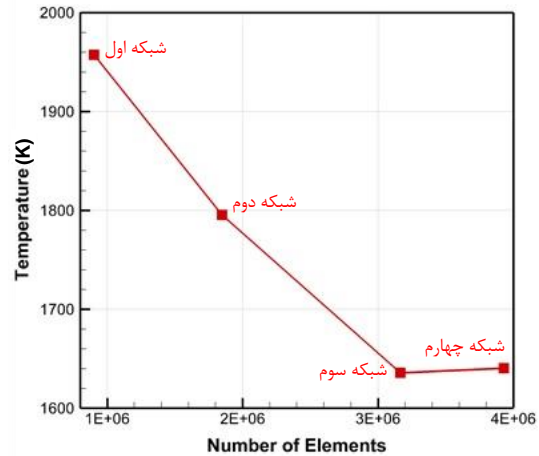
خطا (%)	داده تجربی (کلوین)	شبیه سازی عددی (کلوین)
۱/۰	۶۱۶/۴۸۳	۶۱۰/۱۴۶



شکل ۶- شبکه محاسباتی تولید شده الف) کوره، ب) برش عمودی کوره، پ) نمای نزدیک از برش عمودی کوره و ت) سطح کویل

جدول ۳- مقادیر ضرایب زیر تخفیف برای حل عددی

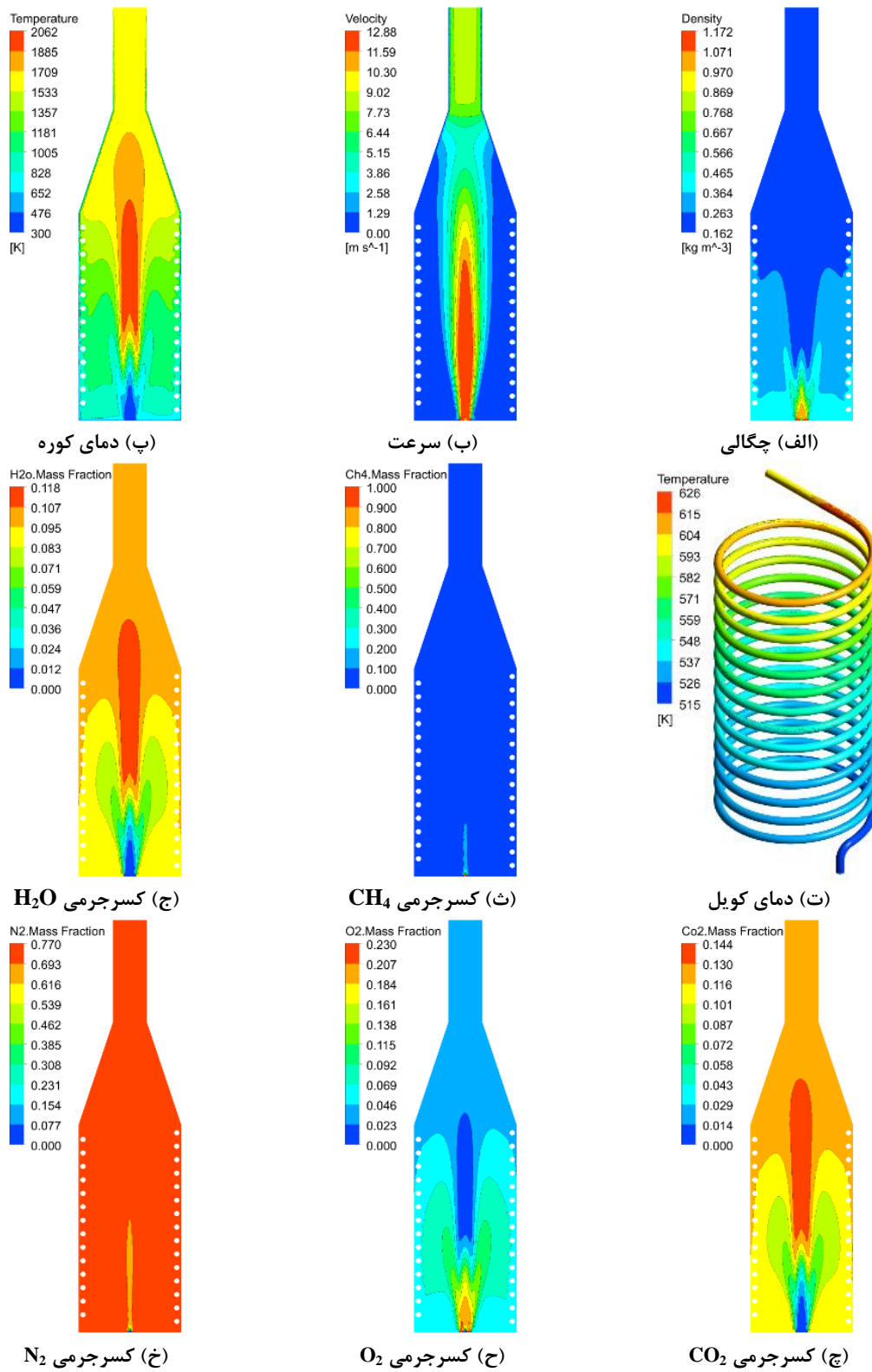
مقدار	متغیر
۰/۵	فشار
۰/۵	مومنتوم
۰/۲۵	چگالی
۰/۷۵	انرژی جنبشی آشفتگی
۰/۷۵	نرخ اضمحلال آشفتگی
۱	لزجت آشفتگی
۰/۷۵	متان، اکسیژن، دی اکسید کربن، آب
۰/۷۵	آلاینده
۰/۷۵	واریانس دما
۰/۷۵	انرژی
۱	مختصات گسسته



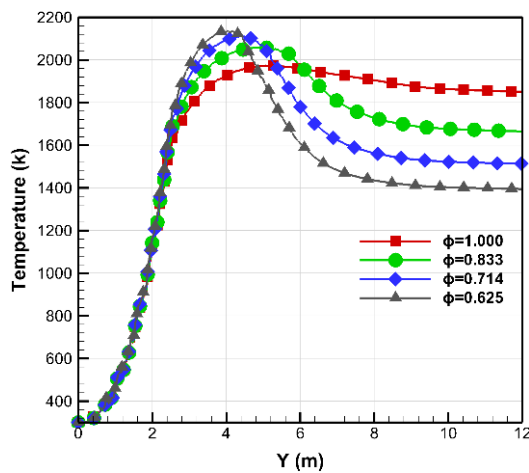
شکل ۵- مطالعه استقلال حل از شبکه

به عنوان شبکه محاسباتی نهایی انتخاب شده است. نمایی از این شبکه در شکل ۶ نشان داده شده است.

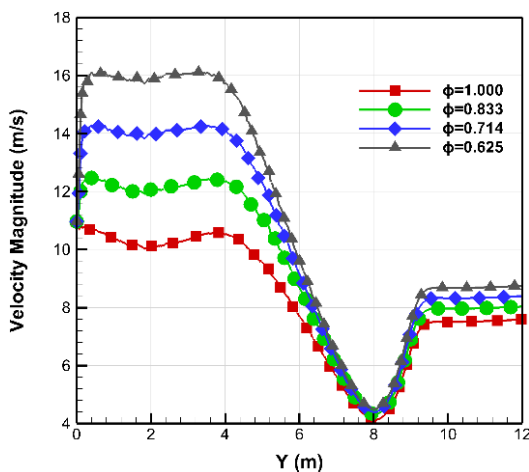
دمای خروجی کویل مارپیچ به دست آمده از حل عددی با داده های تجربی تهیه شده توسط دفتر فنی شرکت پتروشیمی رازی جهت اعتبارسنجی در جدول ۴ مقایسه شده اند. همان طور که مشاهده می شود، خطای بسیار ناچیز



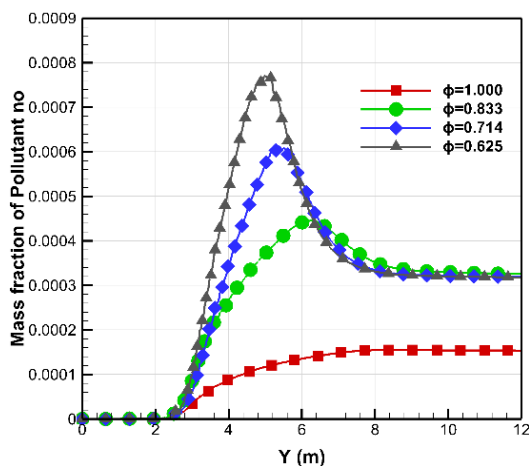
شکل ۷- کانتور پارامترهای مورد مطالعه



شکل ۸- تاثیر نسبت هم‌ارزی بر دما روی محور مرکزی کوره



شکل ۹- تاثیر نسبت هم‌ارزی بر سرعت در مرکز کوره

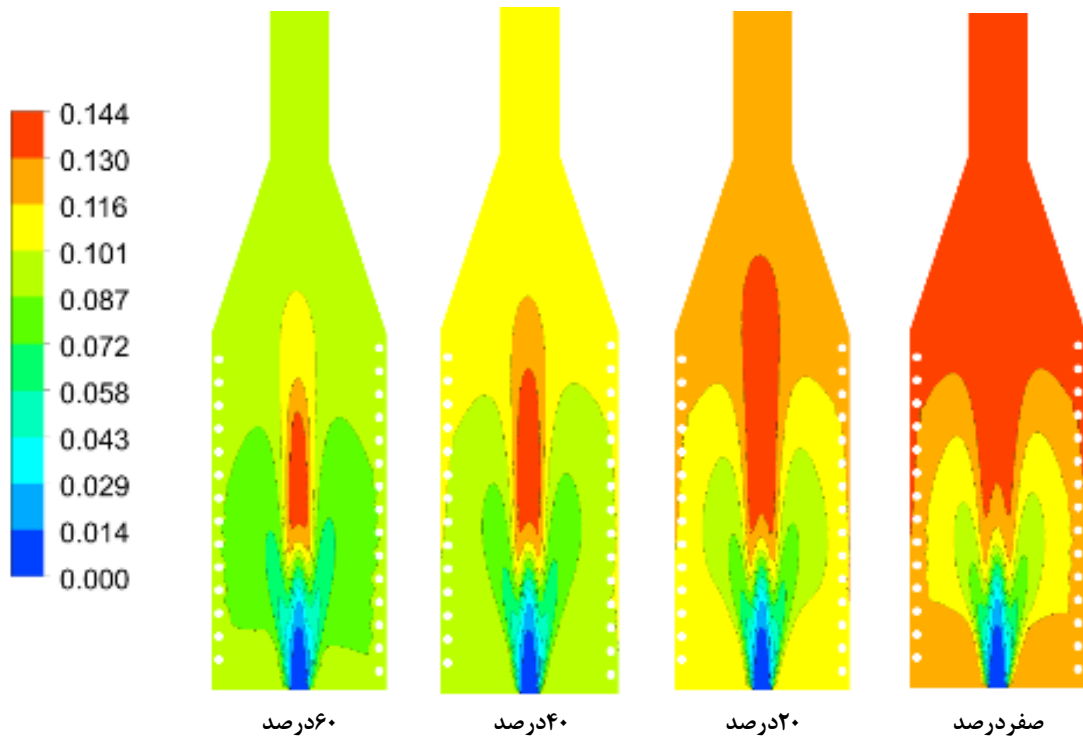


شکل ۱۰- تاثیر نسبت هم‌ارزی بر توزیع تولید آلاینده‌ها در امتداد محور مرکزی کوره

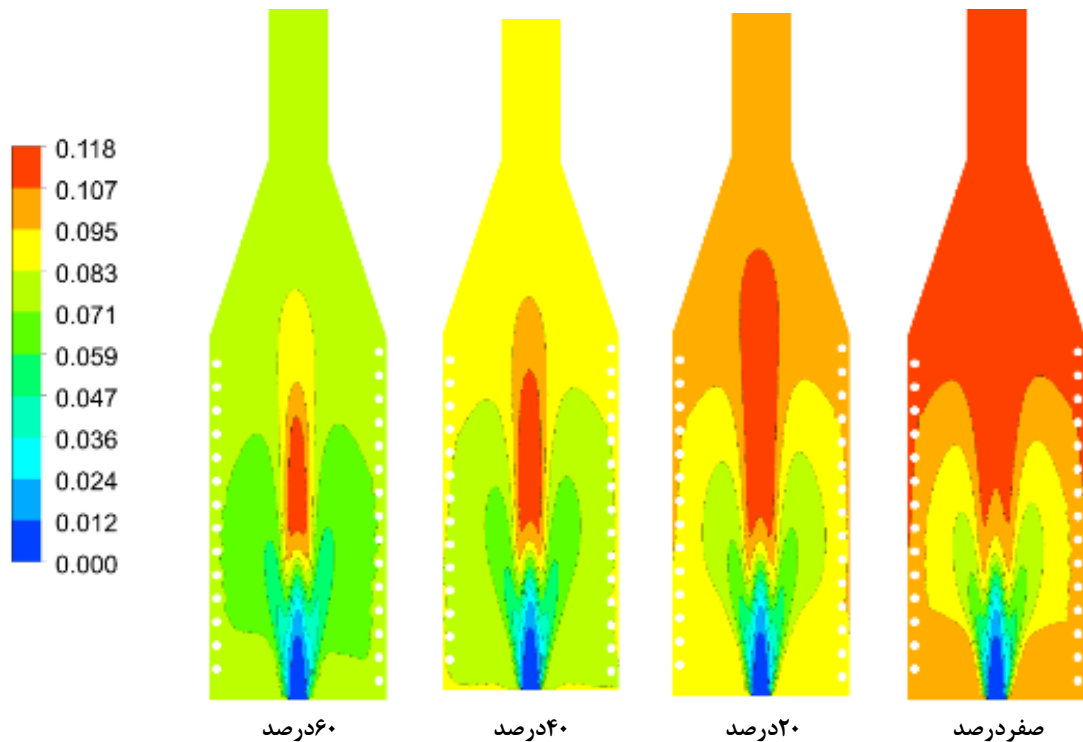
بر ثانیه به دست می‌آید. در شکل ۸ تاثیر نسبت هم‌ارزی بر دما روی محور مرکزی کوره (راستای محور Y در شکل ۱-ب) آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با کاهش نسبت هم‌ارزی، دمای خروجی کوره کاهش می‌یابد. دلیل این امر، دمای پایین‌تر هوای اضافی و اختلاط آن با هوای موجود در کوره است. دلیل دمای بالاتر در خروجی کوره، برای نسبت هم‌ارزی بالاتر، فرصت بیشتر جریان‌های مختلف به منظور اختلاط بهتر داخل کوره است. در شکل ۹ تاثیر نسبت هم‌ارزی بر سرعت روی محور مرکزی کوره نمایش داده شده است. با کاهش نسبت هم‌ارزی، اندازه سرعت جریان سیال در کوره افزایش می‌یابد. این مطلب زمان ماندگاری سوخت در داخل کوره را کاهش می‌دهد. به عبارت دیگر، مقادیر سرعت در حالتی که هوای اضافی وجود دارد، بسیار بیشتر از حالتی است که هوای اضافی وجود ندارد که باعث اختلاط کم‌تر جریان در کوره می‌شود.

در شکل ۱۰ تاثیر نسبت هم‌ارزی بر تولید آلاینده در راستای محور مرکزی کوره آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با کاهش نسبت هم‌ارزی، مقدار آلاینده افزایش می‌یابد. به منظور روشن‌تر شدن علت افزایش NO_x تولیدی، باید نحوه تغییرات دمای بیشینه درون کوره را بررسی کرد. همان‌طور که در نمودار توزیع دمای شکل ۸ مشاهده می‌شود، با کاهش نسبت هم‌ارزی تا ۰/۶۲۵، دمای بیشینه درون هسته فرآیند احتراق تا مقدار بیشینه ۲۱۴۳ کلین افزایش می‌یابد. با توجه به آن که بیش‌ترین مقدار NO_x در جایی تولید می‌شود که بیش‌ترین دمای احتراق وجود دارد، بنابراین روشن است که با افزایش دمای بیشینه درون کوره، NO_x تولیدی افزایش یابد.

شکل ۱۱ و شکل ۱۲ کانتور تولید محصولات احتراق به ترتیب مربوط به دی‌اکسید کربن و بخار آب درون کوره را نشان می‌دهند. از آن‌جا که در اینجا دبی سوخت ثابت است و دبی هوا افزایش می‌یابد، میزان تولید محصولات احتراق (دی‌اکسید کربن و بخار آب) متناسب با کاهش نسبت هم‌ارزی، کاهش می‌یابد. همان‌طور که از نمودارها مشاهده می‌شود، رفتار تولید محصولات احتراق در ابتدای محفظه کوره یکسان است. هرچه به انتهای کوره نزدیک‌تر می‌شود، مقدار تولید محصولات احتراق با کاهش نسبت هم‌ارزی هوا به سوخت متناسب است؛ اما با نسبت درصد هوای اضافی این



شکل ۱۱- کانتور توزیع کسر جرمی CO₂ در درصدهای هوای اضافی مختلف



شکل ۱۲- کانتور توزیع کسر جرمی H₂O در درصد هوای اضافی متفاوت

۷- مراجع

- [1] Barten H (2005) International Energy Agency. Electricity/heat in world in.
- [2] EV, D.S.A. (2011) CO2 emissions from fuel combustion.
- [3] Jia Y, Zhou W, Tang J, Luo Y (2020) Design optimization and cfd evaluation of a volute swirl burner with central gas supply. J Braz Soc Mech Sci 42.
- [4] Silva Neto GC, Chui DS, Martins FP, Fleury AT, Furnari F, Trigo FC (2021) Identification of co2 and o-2 emissions dynamics in a natural gas furnace through flame images, armax models, and kalman filtering. J Braz Soc Mech Sci 43.
- [5] Mancini M, Weber R, Bollettini U (2002) Predicting NOx emissions of a burner operated in flameless oxidation mode. Proceedings of the combustion institute 29(1): 1155-1163.
- [6] Yang W, Blasiak W (2005) Numerical study of fuel temperature influence on single gas jet combustion in highly preheated and oxygen deficient air. Energy 30(2-4): 385-398.
- [7] Vuthaluru R, Vuthaluru HB (2006) Modelling of a wall fired furnace for different operating conditions using FLUENT. Fuel Process Technol 87(7): 633-639.
- [8] De A, Oldenhof E, Sathiah P, Roekaerts D (2011) Numerical simulation of delft-jet-in-hot-coflow (djh) flames using the eddy dissipation concept model for turbulence-chemistry interaction. Flow Turbulence Combust 87(4): 537-567.
- [9] Yapıcı H, Kayataş N, Albayrak B, Baştürk G (2005) Numerical calculation of local entropy generation in a methane-air burner. Energ Convers Manage 46(11-12): 1885-1919.
- [10] Saario A, Rebola A, Coelho P, Costa M, Oksanen A (2005) Heavy fuel oil combustion in a cylindrical laboratory furnace: measurements and modeling. Fuel 84: 359-369.
- [11] Elorf A, Sarh B (2019) Excess air ratio effects on flow and combustion characteristics of pulverized biomass (olive cake). Case Stud Therm Eng 13: 100367.
- [12] Tu Y, Xu S, Xie M, Wang Z, Liu H (2021) Numerical simulation of propane MILD combustion in a lab-scale cylindrical furnace. Fuel 290: 119858.

[۱۳] عباسی سح، امی فالف، صبوحی ز (۱۳۹۹) مطالعه عددی مشخصات جریان در یک محفظه احتراق پاشش مستقیم رفیق تک المان. نشریه علمی مکانیک سازه‌ها و شماره‌ها ۳۰۲-۲۸۷: (۴): ۱۰.

مطلب برعکس است. دلیل آن در مکان تشکیل شعله است. هر چه میزان درصد هوای اضافی بیش‌تر شود، سرعت هوا افزایش می‌یابد؛ در نتیجه سوخت و هوا بهتر مخلوط شده و شعله نزدیک‌تر به ابتدای محفظه تشکیل می‌شود. در این حالت واکنش زودتر انجام شده و پایان می‌پذیرد؛ بنابراین تولید محصولات سرعت بیش‌تری می‌یابد و محصولات زودتر تشکیل شده و به طول کم‌تری از محفظه نیاز است.

۵- نتیجه‌گیری پایانی

در این مقاله، احتراق گاز متان با هوا در کوره استوانه‌ای عمودی واحد آمونیاک پتروشیمی رازی جهت ارزیابی تاثیر نسبت هم‌ارزی هوا-سوخت حل عددی شده است. بررسی نتایج نشان داد، دمای خروجی کوره با کاهش نسبت هم‌ارزی به دلیل دمای پایین‌تر هوای اضافی و اختلاط آن با هوای موجود در کوره کاهش می‌یابد؛ اما به عکس، اندازه سرعت جریان سیال در کوره افزایش می‌یابد. در صورت وجود هوای اضافی شکل شعله تغییر می‌کند. در این حالت احتراق در یک ناحیه محدودتر صورت می‌گیرد. دمای بالاتری در مرکز شعله پدید می‌آید و طول شعله کاهش می‌یابد. میزان تولید محصولات احتراق با کاهش نسبت هم‌ارزی متعاقباً کاهش می‌یابد. تولید محصولات در سرعت‌های پایین هوا با سرعت کم‌تری در ابتدای محفظه کوره همراه است. سرعت تولید هر چه به انتهای کوره نزدیک‌تر می‌شود، بیش‌تر می‌شود؛ اما در سرعت‌های بالاتر هوا، این امر برعکس است. با افزایش درصد هوای اضافی، سوخت و هوا بهتر مخلوط می‌شود و شعله نزدیک‌تر به ابتدای محفظه تشکیل می‌شود. در این حالت واکنش زودتر انجام می‌شود و میزان کسر جرمی سوخت کم می‌شود. در صورتی که واکنش با هوای اضافی انجام گیرد، مقداری اکسیژن از انتهای محفظه کوره خارج می‌شود. در سرعت‌های بالای هوا سرعت مصرف اکسیژن بیش‌تر است و در طول محفظه این سرعت کاهش پیدا می‌کند. در نهایت با اتمام واکنش، مصرف اکسیژن متوقف می‌شود و مقدار اکسیژن اضافی از انتهای محفظه خارج می‌شود.

۶- تشکر و قدردانی

این مقاله توسط دانشگاه شهید چمران اهواز تحت قرارداد پژوهانه شماره SCU.EM99.26639 پشتیبانی شده است.

- ورودی و طول محفظه بر دینامیک شعله پیش‌آمیخته جزئی در راکتورهای ابعاد مزو استوانه‌ای شکل با قطر ثابت و طول‌های مختلف. ماهنامه علمی-پژوهشی مهندسی مکانیک مدرس ۲۷۰۸-۲۶۹۷: ۲۰(۱۲).
- [۲۱] حاتمی م، قلی‌پور ع (۱۴۰۰) مطالعه تجربی و بهینه‌سازی عددی پارامترهای هندسی مشعل در کوره پیش‌گرم خط پرس مجتمع صنعتی فولاد اسفراین. ماهنامه علمی-پژوهشی مهندسی مکانیک مدرس ۴۷۹-۴۸۸: ۲۱(۷).
- [۲۲] میرباقری م، مظاهری ک، ابراهیمی فردویی الف، علی‌پور ع (۱۳۹۹) مطالعه عددی تاثیر توان مشعل شعله تخت بر ایجاد توزیع دمایی یکنواخت در کوره‌های کراکینگ. نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر ۱۳۹۶-۱۳۷۹: ۵۲(۶).
- [23] White FM (2011) Fluid Mechanics. 7th Edition, McGraw-Hill.
- [24] Zhang C, Ishii T, Hino Y, Sugiyama S (2000) The numerical and experimental study of non-premixed combustion flames in regenerative furnaces. J Heat Transfer 122(2): 287-293.
- [25] Cengel YA, Boles MA (2015) Thermodynamics: An Engineering Approach. 8th Edition, McGraw-Hill.
- [26] Yang X, Clements A, Szuhánszki J, Huang X, Moguel OF, Li J, Gibbins J, Liu Zh, Zheng Ch, Ingham D, Ma L, Nimmo B (2018) Prediction of the radiative heat transfer in small and large scale oxy-coal furnaces. Appl. Energy 211: 523-537.
- [27] Zel'dovich YB (1946) The oxidation of nitrogen in combustion explosions. Acta Physicochimica U.S.S.R. 21: 577-628.
- [28] van Essen VM, Sepman AV, Mokhov AV, Levinsky HB (2007) The effects of burner stabilization on Fenimore NO formation in low-pressure, fuel-rich premixed CH₄/O₂/N₂ flames. P Combust Inst 31(1): 329-337.
- [۱۴] موسوی‌ترشیزی س‌الف، رفیعی ع، سعادت‌الف (۱۳۸۴) شبیه‌سازی مشعل‌های نیروگاه شازند به روش عددی و بررسی اثر هوای اولیه بر شکل و محل شعله. بیستمین کنفرانس بین‌المللی برق، تهران، ایران.
- [۱۵] سهرابی‌کاشانی الف (۱۳۸۴) افزایش راندمان احتراق در بویلرهای نیروگاهی از طریق تنظیم هوای اضافی. اولین کنفرانس احتراق ایران، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران.
- [۱۶] جلیلی‌مهر م، مقیمان م، نیازمند ح (۱۳۹۶) مطالعه اثر پیش‌گرمایش سوخت گاز طبیعی بر تشکیل دوده، درخشندگی شعله و انتشار NO به روش عددی و آزمایشگاهی. نشریه علمی مکانیک سازه‌ها و سازه‌ها ۷۹-۹۰: ۷(۱).
- [۱۷] شریعتی ع، ثقه‌الاسلامی ن (۱۳۹۷) مطالعه عددی پارامترهای اثرگذار در مشعل محیط متخلخل با ایجاد یک شیار در محور ماتریس تخلخل. نشریه علمی مکانیک سازه‌ها و سازه‌ها ۳۲۷-۳۴۰: ۸(۳).
- [۱۸] کیانی م، باشی ح، هوشفر الف (۱۳۹۸) بررسی عددی میدان دمایی و ساختار شعله آرام گاز متان و هیدروژن در جت‌های برخوردی مایل. نشریه علمی مکانیک سازه‌ها و سازه‌ها ۲۵۱-۲۶۱: ۹(۴).
- [۱۹] حشمتی ن، میرساجدی س‌م (۱۳۹۹) بررسی آزمایشگاهی اثر تغییرات طول نازل مشعل بر مشخصه‌های احتراقی شعله پیش‌آمیخته چرخشی. ماهنامه علمی-پژوهشی مهندسی مکانیک مدرس ۲۵۰۹-۲۵۱۵: ۲۰(۱۰).
- [۲۰] زرگرباشی ع، تابع‌جماعت ص، صرافان‌صادقی س، شیخ بگلو س (۱۳۹۹) بررسی تجربی اثر مشخصه‌های جریان