

مطالعه سینتیکی اثر اندازه ذرات دوده در هم‌سوزی متان-کربن بر مؤلفه‌های سینتیکی و گونه‌های اساسی احتراق

علی سعیدی^{۱*}، رضا جلالی مهرآباد^۲

^۱ استادیار دانشکده مهندسی دانشگاه بیرجند، بیرجند، ایران

Ali.saeedi@birjand.ac.ir

^۲ دانشجوی کارشناسی ارشد دانشکده مهندسی دانشگاه بیرجند، بیرجند، ایران

Rezajalali@birjand.ac.ir

چکیده: تابش پایین شعله آبی‌رنگ متان به چالشی در اکثر صنایع تبدیل شده است. حضور دوده و ذرات کربن در ترکیب گاز متان، موجب افزایش سطح درخشندگی و تابش حرارتی شعله آن می‌شود. اما اثر این افزودنی بر تولید آلاینده‌ها و همچنین روند واکنشی احتراق متان، موضوعی است که کمتر به آن توجه شده است. در این بین، یکی از مؤلفه‌های مهم در اثرپذیری این افزودنی، اندازه ذرات کربن است. لذا در تحقیق حاضر در یک نگاه سینتیکی و با استفاده از روش EPM و مکانیزم GRI3.0، اثر افزودن ذرات بزرگ و ریز کربن به احتراق متان مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد افزودن ذرات ریز کربن به احتراق متان، با افزایش سطح واکنشی مکانیزم احتراق، باعث افزایش دمای آدیاباتیک شعله و رشد کسر مولی آلاینده‌های احتراق می‌شود. اما ذرات بزرگ کربن پس از تجزیه حرارتی در ناحیه پیش‌گرم، فعال شده و در واکنش‌ها شرکت می‌کنند. از این‌رو افزایش دما و افزایش کسر مولی گونه‌های احتراق در مقایسه با حالت افزودن ذرات ریز کربن بسیار ناچیز است. همچنین نسبت هم‌ارزی بر رفتار دمای واکنش با افزودن دوده موثر بوده و برای ذرات ریز در همه نسبت‌های هم‌ارزی افزایش دما مشاهده می‌شود.

واژه‌های کلیدی: احتراق، سینتیک شیمیایی، ابعاد ذرات، متان، دوده.

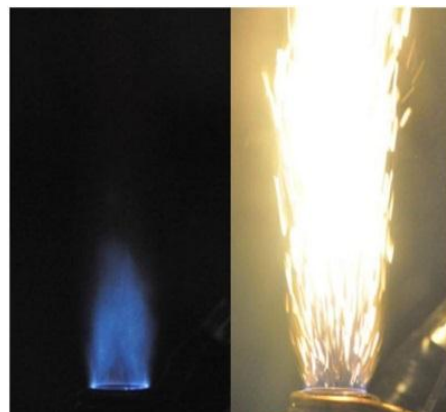
۱. مقدمه

دوده و ذرات کربن (کوچک‌تر از $100\mu\text{m}$) که در اکثر فعالیت‌های صنعتی از قبیل ماشین‌کاری، استخراج، ساخت و دیگر فرایندهای مشابه تولید می‌شوند، هنگام پخش شدن در هوا، به دلیل افزایش سطح انتقال جرم و حرارت، بسیار واکنش‌پذیر شده و در شرایط مشخصی حتی امکان انفجار را نیز خواهند داشت [۱]. نمونه‌هایی از این پدیده را می‌توان در انفجار معادن زغال‌سنگ مشاهده کرد [۲].

اما در کنار نقش منفی این پدیده، می‌توان از این سطح اشتعال‌پذیری و اثر واکنشی ذرات کربن، برای بهبود عملکرد احتراق گاز طبیعی در تجهیزات صنعتی بهره برد.

در حال حاضر، به دلیل تابش پایین شعله آبی‌رنگ احتراق گاز طبیعی، راندمان انتقال حرارت از شعله دستگاه‌های احتراقی با سوخت گاز طبیعی در مقایسه با سایر سوخت‌های فسیلی، افت چشمگیری را متحمل شده است. کنتنو و همکاران [۳] با بررسی عددی-آزمایشگاهی عوامل مؤثر بر تابش شعله متان، نشان دادند در بین گونه‌های شرکت‌کننده در واکنش‌های احتراق، ذرات کربن در ضمن تولید شعله‌ای درخشان و زردرنگ، بیشترین تابش حرارتی را در ناحیه فروسرخ و مرئی انجام می‌دهند.

راکول و رانگوالا [۴] در یک تحقیق آزمایشگاهی و توسط فناوری HFA^۱ به بررسی اثر افزودن ذرات ریز پودر زغال‌سنگ به ساختار شعله پیش‌آمیخته متان پرداختند. تصویربرداری مختلف از شعله در این آزمایش نشان داد افزودن ذرات کربن علاوه بر درخشان نمودن شعله، سرعت و حجم شعله را نیز بسیار افزایش می‌دهد. نتیجه این آزمایش را می‌توان در شکل (۱) مشاهده کرد.



شکل (۱): مقایسه شعله در حالت افزودن ذرات کربن و حالت عادی احتراق متان [۴] (سمت چپ احتراق طبیعی متان و سمت راست احتراق به همراه تزریق ذرات کربن (زغال‌سنگ))

این نتایج آزمایشگاهی در کنار نتایج عددی سنتنو [۳] نشان از نقش مهم و بارز تزریق کربن بر بهبود تابش شعله گاز طبیعی دارد. لذا افزودن این‌گونه به ورودی احتراق متان را می‌توان از بهترین روش‌های بهبود تابش حرارتی شعله قلمداد کرد. اما در کنار جنبه‌های مثبت هم‌سوزی متان و دوده و تأثیر مثبت آن بر تابش شعله، اثر افزودن کربن به صورت دوده یا پودر زغال‌سنگ بر دیگر جنبه‌های مکانیزم احتراق متان موضوعی است که نیاز به بررسی بیشتری دارد.

مینکای و همکاران [۵] در یک کار آزمایشگاهی، به بررسی اثر افزودن ذرات ریز زغال‌سنگ بر شعله پیش‌آمیخته متان پرداختند. در این تحقیق، اندازه ذرات بین $95-75\mu\text{m}$ انتخاب شده و در بازه نسبت هم‌ارزی $0/9$ تا $1/2$ آزمایش‌ها را انجام دادند. نتایج این تحقیق نشان می‌دهد در نسبت هم‌ارزی کمتر از ۱، افزودن ذرات موجب افزایش دما و سرعت شعله خواهد شد، اما در نسبت هم‌ارزی‌های بالاتر از ۱ سرعت و دمای شعله نسبت به حجم تزریقی به صورت خطی کاهش می‌یابد. همچنین ژای و همکاران [۶] به بررسی اثر اندازه ذرات افزودنی پودر زغال‌سنگ به شعله پیش‌آمیخته متان-هوا در نسبت‌های هم‌ارزی کمتر از ۱ پرداخته‌اند. نتایج نشان‌دهنده نقش مهم اندازه ذرات افزودنی کربن بر روند احتراق بوده به صورتی که افزودن ذرات با قطر کوچک‌تر از ۲۵ میکرون، موجب افزایش دمای احتراق شده و برای ذرات با قطر بزرگ‌تر از ۹۵ میکرون، کاهش نسبی دما رخ می‌دهد. لذا اندازه ذرات افزودنی از مشخصه‌های مهم در فرایند به شمار می‌رود.

هاروات و همکاران [۷] در یک کار عددی-آزمایشگاهی، اثر افزودن ذرات ساییده‌شده زغال‌سنگ را به یک شعله پیش‌آمیخته متان مورد بررسی قرار دادند. نتایج آنان نشان‌دهنده تأثیر قابل توجه افزایش حضور ذرات کربن بر کسر مولی گونه‌های CO و CO₂ است.

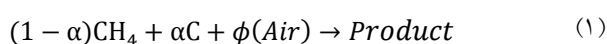
اگولفولوس و فوکین [۸] در یک کار عددی و با استفاده از مکانیزم GRI 2.1 و حل همزمان معادلات مومنتوم و انرژی، به بررسی اثر هم‌سوزی متان و گرافیت بر سرعت شعله و تولید آلاینده NO پرداختند. نتایج آنان نشان داد حضور ذرات کربن با افزایش دمای واکنش موجب تولید بیشتر این آلاینده احتراق می‌شود.

رالف [۹] در یک تحقیق عددی، به بررسی تأثیر ابعاد ذرات بر رفتار احتراقی آنان پرداخته است. نتایج این تحقیق نشان داد با بزرگ شدن ابعاد ذرات، حداقل انرژی لازم برای اشتعال‌پذیری آن‌ها به صورت خطی افزایش و تغییرات زمانی چگالی آن‌ها به صورت خطی کاهش می‌یابد.

ژای و همکاران [۶] در یک کار عددی-آزمایشگاهی، به بررسی اثر اندازه ذرات افزودنی پودر زغال‌سنگ به شعله پیش‌آمیخته متان-هوا

این دو حالت را می‌توان به‌عنوان حالت کمینه و بیشینه اندازه ذرات کربن در نوع رفتار آن‌ها در احتراق مد نظر قرار داد که با توجه به تحقیقات ژای و همکاران [۶] برای ذرات دوده با قطر کمتر از $25 \mu m$ فرض رفتار گازی (حالت اول) و برای ذرات با قطر بالاتر از $95 \mu m$ فرض رفتار جامد استیوکیومتریکی مورد بررسی قرار می‌گیرد. باقی ابعاد در بین این دو محدوده قرار خواهند گرفت و رفتاری بین این دو حالت را خواهند داشت.

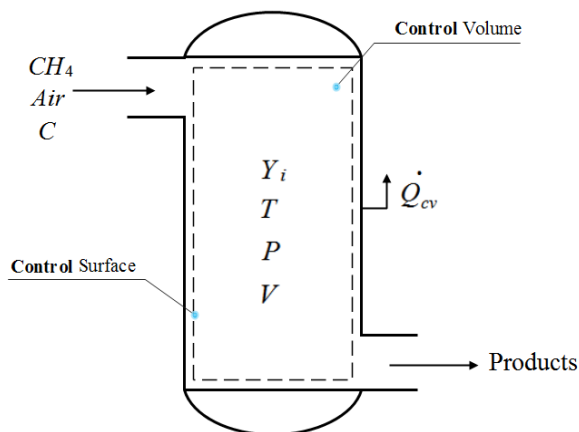
احتراق متان-کربن برای هر دو حالت به‌صورت معادله (۱) مدل‌سازی شده است.



در این معادله، مقادیر α به ترتیب ۰، ۰/۰۴، ۰/۰۸، ۰/۱۲، ۰/۱۶ و ۰/۲۰ انتخاب شده است و ترکیب هوا به‌صورت $O_2+3.71N_2+0.047Ar$ خواهد بود.

۲.۲. فرضیات

مکانیزم احتراق مطابق شکل (۲) در یک راکتور کاملاً پیش‌آمیخته (PSR^2) و در فضای صفر بعدی مورد بررسی قرار خواهد گرفت. در شرایط صفر بعدی فرض شرایط دائم، دما و فشار یکنواخت و کسر مولی همگن در تمامی محدوده حجم کنترل حاکم است. فرایند دارای یک ورودی (واکنش‌دهنده‌ها) و یک خروجی (محصولات) در حجم مشخص بوده، لذا احتراق در شرایط فشار محیط و حجم ثابت رخ می‌دهد.



شکل (۲): طرح‌واره راکتور پیش‌آمیخته

یونسی و همکاران [۱۰] با بررسی شرایط متفاوت دمایی و فشاری برای احتراق متان نشان دادند در شرایط فشار ۱ اتمسفر و دماهای بالاتر از ۱۵۰۰ درجه سانتی‌گراد، شرایط تعادلی در واکنش‌های زنجیره‌ای این مکانیزم حاکم است. بنابراین با توجه به دمای احتراق متان، واکنش‌های

در نسبت‌های هم‌ارزی کمتر از یک پرداخته‌اند. بررسی تغییرات سرعت شعله آرام و همچنین دمای احتراق، نشان‌دهنده نقش مهم اندازه ذرات بر این پدیده بوده که افزودن ذرات کوچک از $25 \mu m$ موجب افزایش سرعت و دمای احتراق شده و برای ذرات بزرگ‌تر از $95 \mu m$ کاهش نسبی این مشخصه‌ها مشاهده می‌شود.

با توجه به مطالب بیان‌شده در اهمیت بررسی تلفیق ذرات کربن با سوخت گاز طبیعی، اثر این هم‌سوزی بر بهبود تابش شعله اثبات شده است. اما اثر این افزودنی بر تولید آلاینده‌ها و همچنین روند واکنشی احتراق متان موضوعی است که کمتر به آن توجه شده است؛ در تحقیق حاضر این مهم مورد توجه قرار گرفته است. علاوه بر آن با توجه به اثر مهم اندازه ذرات کربن در رفتار واکنشی احتراق، تحقیق حاضر در یک نگاه سینتیکی و با استفاده از روش EPM^1 و مکانیزم $GRI3.0$ در دو حالت به مدل‌سازی اثر افزودن ذرات بزرگ و ریز کربن بر احتراق متان خواهد پرداخت. اثر بزرگ یا ریز بودن اندازه ذرات کربن در این هم‌سوزی بر دمای آدیاباتیک شعله و تغییرات کسر مولی گونه‌های مهم CO_2 ، CO و NO بررسی می‌شود. علاوه بر آن، به‌منظور بررسی اثر دما در افزودن ذرات کربن به بررسی مسیر تغییرات گونه C در واکنش‌های زنجیره‌ای احتراق برای دو دمای عملکردی مختلف پرداخته خواهد شد.

۲. مبانی حل

۱.۲. مسئله

در مدل‌سازی احتراق متان، ترکیب سوخت (CH_4) و هوا ($O_2+3.7143N_2+0.04762Ar$) به‌صورت یک گاز ایدئال فرض شده و رفتار ترمودینامیکی سیال توسط معادله گاز کامل شبیه‌سازی می‌شود. اما در مدل‌سازی افزودن کربن، بر اساس اندازه ذرات دو دیدگاه متفاوت وجود دارد. در حالت اول می‌توان ذرات کربن را آن‌قدر ریز در نظر گرفت که رفتار یک گاز را داشته باشند و همانند گاز متان از معادله گاز کامل برای شبیه‌سازی ارتباط بین خواص ترمودینامیکی آن استفاده کرد. اما در دیدگاهی دیگر، برای بررسی اثر افزودن ذرات بزرگ‌تر کربن، می‌توان آن را به‌صورت ذراتی جامد در نظر گرفت که به همراه سوخت و هوا وارد محفظه شده و یک‌فاز جامد-گاز را ایجاد می‌کنند که در آن، واکنش بین ذرات جامد کربن و گازهای حاضر در محفظه احتراق رخ خواهد داد. در این شرایط با توجه به نتایج رالف [۹]، چگالی ذرات کربن ثابت و عملکرد واکنشی آن مطابق ضرایب سینتیکی ناسا برای کربن جامد، مدل‌سازی خواهد شد.

$$\min(G(T, P, n) = \sum_{i=1}^N n_i \mu_i) \quad (7)$$

با اعمال معادله بقای گونه‌ها (معادله ۱) و با استفاده از روش

ضرایب لاگرانژ محاسبه می‌شود:

$$\zeta(n, \lambda) = \sum_{i=1}^N n_i \mu_i + \sum_{k=1}^M \lambda_k (b_k - \sum_{i=1}^N a_{ki} n_i) \quad (8)$$

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial \zeta}{\partial n_i} \right) = \mu_i - \sum_{k=1}^M a_{ki} \lambda_k = 0 \\ \left(\frac{\partial \zeta}{\partial \lambda_k} \right) = b_k - \sum_{i=1}^N a_{ki} n_i = 0 \end{cases} \quad (9)$$

که در آن، λ_k تابع ترکیبی و λ_k ضریب گونه k در فرمول شیمیایی گونه i است.

حل دستگاه معادله غیرخطی (۹) برای تمامی واکنش‌های زنجیره‌ای، گونه‌ها و عناصر شرکت‌کننده در واکنش ترکیب تعادلی محصولات خروجی را به‌ازای هر نوع ترکیبی از هوا و سوخت ورودی مشخص خواهد کرد.

محاسبه دمای آدیاباتیک شعله در شرایط فشار ثابت با توجه به تعریف این کمیت از برابری آنتالپی واکنش دهنده‌ها و محصولات محاسبه می‌گردد.

$$H_{React}(T_i, P) = H_{Prod}(T_{ad}, P) \quad (10)$$

محاسبه آنتالپی هر گونه از رابطه زیر برای دماهای مشخص محاسبه می‌شود.

$$h_i(T) = h_f(T_{ref}) + \int_{T_{ref}}^T C_{p_i} dT \quad (11)$$

نسبت هم‌ارزی در علم احتراق بر اساس کسر هوا به سوخت به‌صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\phi = \frac{(A/F)_{Stio}}{(A/F)_{act}} \quad (12)$$

در این معادله، کمیت $(A/F)_{Stio}$ و کمیت $(A/F)_{act}$ به ترتیب بیانگر نسبت مول هوا به سوخت در معادله استوکیومتری و در شرایط واقعی احتراق است. با توجه به معادله (۱۱) در $\phi=1$ حالت استوکیومتری بر احتراق حاکم بوده و در $\phi < 1$ مخلوط سوخت و هوای غنی و برای $\phi > 1$ مخلوط سوخت و هوا ورودی احتراق رقیق خواهد بود.

۴.۲. روش تحقیق

با توجه به مطالب ذکر شده در شبیه‌سازی افزودن کربن به احتراق متان

زنجیره‌ای در حالت تعادلی بوده و برای محاسبه مقادیر کسر مولی گونه‌های خروجی و کمیت‌های ترمودینامیکی احتراق از معادلات شرایط تعادلی استفاده خواهد شد.

۳.۲. معادلات حاکم

در یک واکنش شیمیایی که شامل تجزیه و ترکیب گونه‌های مختلف با یکدیگر بوده، اولین و مهم‌ترین معادله، معادله بقای گونه‌هاست.

$$\sum_{i=1}^N a_{ki} n_i = b_k \quad k = 1, 2, \dots, M \quad (2)$$

که در آن، a_{ki} تعداد عنصر k در فرمول شیمیایی گونه i ، b_k مقدار مول کلی عنصر در واکنش (عدد ثابت ورودی)، n_i تعداد مول‌های گونه i ، M تعداد عناصر و N تعداد گونه‌ها در واکنش شیمیایی است.

اما در یک واکنش شیمیایی، تعداد گونه‌ها و عناصر برابر نبوده لذا به معادلات بیشتری برای محاسبه مقادیر کسر مولی تمامی گونه‌ها و مؤلفه‌های سینتیکی واکنش‌های زنجیره‌ای نیاز است که معادلات لازم با تعیین شرایط تعادلی برای حل مقادیر مجهول اتخاذ خواهد شد.

نقطه تعادل یک فرایند زمانی است که آنتروپی ماکزیمم یا انرژی آزاد گیبس به کمینه مقدار خود برسد [۱۱]. بنابراین از این اصل برای محاسبه غلظت گونه‌های تشکیل شده در واکنش‌های شیمیایی استفاده می‌شود.

$$G = G(T, P, n) \quad (3)$$

$$dG = -SdT + \vartheta dP + \sum_{i=1}^N \mu_i dn_i \quad (4)$$

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T, P, n_{j \neq i}} \quad (5)$$

در این معادلات، G تابع آزاد گیبس، T دما، P فشار، n مقادیر مول گونه و N تعداد گونه‌ها در واکنش شیمیایی، μ_i پتانسیل شیمیایی، S آنتروپی و ϑ مقدار حجم ویژه است.

با انتگرال‌گیری از معادله (۴) در شرایط فشار، دما و ترکیب ثابت، رابطه (۶) به دست می‌آید:

$$G(T, P, n) = \sum_{i=1}^N n_i \mu_i \quad (6)$$

روش‌های عددی مختلفی برای کمینه‌سازی معادله (۶) و یافتن ترکیب تعادلی نهایی واکنش شیمیایی در تحقیقات مختلف استفاده شده است که با توجه به سرعت و دقت عملکردی روش EPM، در تحقیق حاضر از این روش استفاده شد.

در روش EPM تابع:

داده‌اند که آخرین ویرایش آن با عنوان GRI-Mech 3.0 شامل ۳۲۵ واکنش شیمیایی و توصیف ضرایب نرخ مرتبط با آن‌ها و خواص ترموشیمیایی ۵۳ گونه تولیدی است [۱۲]. لیست کامل این گونه‌ها در جدول (۳) ارائه شده است. واکنش‌های زنجیره‌ای این مکانیزم در محدوده دمای ۱۰۰۰ کلوین تا ۲۵۰۰ کلوین، فشار ۱ kPa تا ۱۰۰۰ kPa و نسبت هم‌ارزی ۱ تا ۵ به‌طور گسترده‌ای استفاده و اعتبارسنجی شده‌اند [۱۲]. تمامی روابط مربوطه و حل دستگاه معادلات توسط کدهای کانترا در محیط پایتون^۴ انجام شده است. مجموعه کانترا به‌عنوان یک ابزار نرم‌افزاری با مدل برنامه‌نویسی شیء‌گرا در زمینه احتراق، سینتیک شیمیایی، فرایندهای ترمودینامیکی و انتقال جرم و حرارت در سال 2001 توسط دیوید جی گودوین در مؤسسه فناوری کالیفرنیا (کالتک)^۵ طراحی و ارائه شد. کانترا در حال حاضر برای برنامه‌های کاربردی از جمله احتراق، انفجار، تبدیل انرژی الکتروشیمیایی و ذخیره‌سازی، سلول‌های سوختی، باتری‌ها، راه‌حل‌های آبی الکترولیت، پلاسما و رسوب فیلم استفاده شده و با شبیه‌سازی دقیق این فرایندها قادر به محاسبه خواص ترمودینامیکی متفاوتی همچون دمای آدیباتیک شعله، فشار، آنتالپی، آنترپی، انرژی آزاد گیبس و دیگر پارامترهای سینتیکی و پارامترهای مربوط به فرایندهای انتقال جرم و حرارت است. نکته مهم درباره دو نرم‌افزار کانترا و پایتون، ارائه رایگان آن‌ها از سوی شرکت‌های تولیدکننده است که موجب پیشرفت سریع و گسترده آن‌ها در مدل‌سازی‌های احتراقی و مسائل مختلف شده است.

جدول (۳): لیست ۵۳ گونه حاضر در مکانیزم GRI30

شماره	گونه	شماره	گونه	شماره	گونه
1	H ₂	21	CH ₃ OH	41	HCN
2	H	22	C ₂ H	42	H ₂ CN
3	O	23	C ₂ H ₂	43	HCNN
4	O ₂	24	C ₂ H ₃	44	HCNO
5	OH	25	C ₂ H ₄	45	HOCN
6	H ₂ O	26	C ₂ H ₅	46	HNCO
7	HO ₂	27	C ₂ H ₆	47	NCO
8	H ₂ O ₂	28	HCCO	48	N ₂
9	C	29	CH ₂ CO	49	AR
10	CH	30	HCCOH	50	C ₃ H ₇
11	CH ₂	31	N	51	C ₃ H ₈
12	CH ₂ (S)	32	NH	52	CH ₂ CHO
13	CH ₃	33	NH ₂	53	CH ₃ CHO
14	CH ₄	34	NH ₃		
15	CO	35	NNH		
16	CO ₂	36	NO		
17	HCO	37	NO ₂		
18	CH ₂ O	38	N ₂ O		
19	CH ₂ OH	39	HNO		
20	CH ₃ O	40	CN		

در مدل‌سازی فرایند در کدهای کانترا^۱ از فاز استوکیومتریک-جامد^۲ برای ذرات بزرگ کربن (فرض رفتار جامد) و از فاز مخلوط گاز آیدنال^۳ برای ذرات ریز کربن (فرض رفتار گازی) و ترکیب متان-هوا استفاده می‌شود. با ترکیب متان-هوا و کربن با درصدهای مدنظر می‌توان ترکیب کسر مولی گونه‌های خروجی و تغییرات دمای آدیباتیک شعله را مورد بررسی قرار داد.

جدول (۱) واکنش‌های شامل گونه کربن را در مکانیزم GRI30 نشان می‌دهد. C در ۶ واکنش از ۷ واکنش جزو واکنش‌دهنده‌ها بوده لذا افزایش کسر مولی آن در احتراق، روند تولید رادیکال‌های فعالی از قبیل H, O, N را تحت تأثیر قرار خواهد داد. از سوی دیگر، انرژی اساسی احتراق در واکنش‌های پایانی تولید می‌شوند که لیست این واکنش‌ها در جدول (۲) دسته‌بندی شده است. تغییرات کسر مولی CO₂، روند تغییرات دمای آدیباتیک شعله و کسر مولی آلاینده‌های CO و NO در اثر افزودن کربن در دو حالت رفتار گازی و جامد برای ذرات کربن، در ادامه مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

جدول (۱): واکنش‌های شامل گونه C در مکانیزم GRI30

شماره واکنش	معادله واکنش
۱	CH + H <=> C + H ₂
۲	C + OH <=> CO + H
۳	C + O ₂ <=> CO + O
۴	C + CH ₂ <=> C ₂ H + H
۵	C + CH ₃ <=> C ₂ H ₂ + H
۶	C + N ₂ <=> CN + N
۷	C + NO <=> CN + O
۸	C + NO <=> CO + N

جدول (۲): واکنش‌های شیمیایی تولید CO₂ در مکانیزم GRI30

شماره واکنش	معادله واکنش
۹	CH ₂ + O ₂ <=> CO ₂ + 2H
۱۰	HCO + O <=> CO ₂ + H
۱۱	CO + OH <=> CO ₂ + H

۵.۲. ابزار حل

اطلاعات مربوط به واکنش‌های زنجیره‌ای و خواص ترمودینامیکی گونه‌های حاضر در احتراق متان، از نتایج تحقیقات مرکز مطالعات و تحقیقات گاز برگرفته شده است. آن‌ها مکانیزم‌هایی را بسط و توسعه

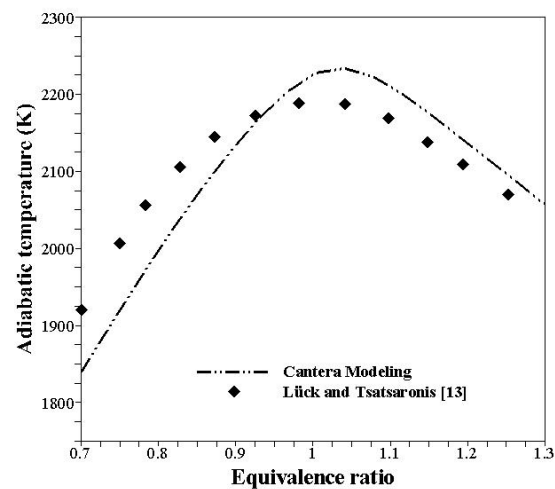
4. Python
5. California Institute of Technology

1. Cantera
2. Stoichiometric-Solid
3. Idea-Gas-Mixtures

۳. نتایج

۱.۳. اعتبار سنجی

مدل‌سازی سینتیکی احتراق متان با افزودن کربن در دو حالت فاز گاز و جامد برای ذرات ریز و بزرگ کربن توسط کدهای کانترا در محیط پایتون انجام شد. اعتبارسنجی عملکرد کد حاضر در شبیه‌سازی احتراق متان توسط نتایج آزمایشگاهی لوک و تساتسارونیز [۱۳] برای تغییرات دمای آدیاباتیک شعله در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف متان-هوا صورت گرفت. نتایج عددی و آزمایشگاهی این مقایسه در شکل (۳) قابل مشاهده است.

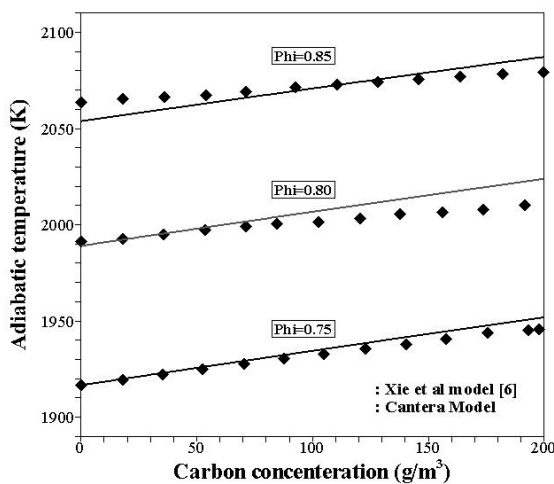


شکل (۳): اعتبارسنجی با نتایج آزمایشگاهی مرجع [۱۳] در مقادیر دمای آدیاباتیک شعله

لوک و تساتسارونیز با تغییر نسبت هم‌ارزی متان-هوا در محدوده ۰/۷ تا ۱/۳، تغییرات دمای آدیاباتیک شعله را گزارش کردند. در مدل‌سازی تحقیق حاضر در حالت احتراق طبیعی متان با تغییر محدوده نسبت هم‌ارزی مطابق مرجع مورد نظر، نمودار خط چین در شکل (۳) حاصل شد. این مقایسه نشان می‌دهد در نسبت هم‌ارزی کمتر از یک و در بازه ۰/۷ تا ۰/۸ اختلاف نتایج مدل‌سازی کانترا و آزمایشگاهی در حدود ۴۰ درصد بوده، اما با پیشروی در نسبت هم‌ارزی و در نسبت نزدیک ۱، مقادیر خطا به ۲ درصد کاهش می‌یابد. علاوه بر آن، نتایج آزمایشگاهی ماکزیم دما را در نسبت هم‌ارزی ۱ ثبت کرده و مدل‌سازی در حدود ۱/۰۵ به این مقدار ماکزیم رسیده است که نشان‌دهنده ۵ درصد خطاست.

همان‌طور که اشاره شد، مدل‌سازی افزودن ذرات ریز کربن با فرض رفتار گازی برای این ذرات توسط معادله گاز کامل در شرایط صفر بعدی مدل شده و اثر حضور گونه C در واکنش‌های احتراقی توسط

مکانیزم GRI3.0 مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به تحقیقات آزمایشگاهی محدود انجام شده در این زمینه، اعتبارسنجی این مدل با مقایسه نتایج عددی اعتبارسنجی شده‌ی زی و همکاران [۶] صورت خواهد گرفت. در تحقیق زی و همکاران [۶] مدل‌سازی افزودن ذرات دوده بر سوخت متان در حالت یک‌بعدی و با بررسی میزان تجزیه حرارتی ذرات دوده در محدوده دمابالای شعله و حل معادلات حاکم مربوط به آن انجام شده است. سشادری و همکاران [۱۴] نرخ تجزیه ذرات دوده با اندازه کوچک‌تر از ۲۵ میکرون مدل را محاسبه کرده و با فرض شرایط تعادلی و حل معادله انرژی و مومنتوم، مقادیر دمای شعله به دست آمده است. اعتبارسنجی نتایج این مدل در مقادیر سرعت آرام شعله با نتایج آزمایشگاهی نشان‌دهنده دقت قابل قبول کد عددی است. با توجه به دقت پایین‌تر مدل‌سازی کد کانترا در نسبت هم‌ارزی کمتر از ۱، مقایسه نتایج اثر افزودن دوده بر تغییرات دمای آدیاباتیک شعله در سه نسبت هم‌ارزی ۰/۷۵، ۰/۸۰ و ۰/۸۵ بین نتایج زی و همکاران و کد حاضر انجام شده که در شکل (۴) نتایج ترسیم شده است. این شکل نشان می‌دهد به‌کارگیری معادله گاز کامل برای تشریح رفتار ذرات کربن در طول فرایند احتراق، دقتی مشابه استفاده از مدل سشادری و محاسبه نرخ تجزیه حرارتی ذرات داشته که با توجه به دقت قابل قبول مدل زی و همکاران، استفاده از این فرضیه نیز از دقت کافی برخوردار خواهد بود.

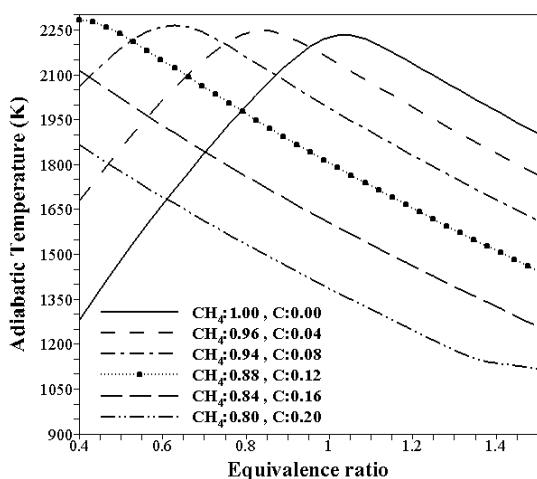


شکل (۴): اعتبارسنجی فرض رفتار گازی برای ذرات ریز دوده با مدل زی و همکاران [۶] در تغییرات دمای آدیاباتیک شعله

۲.۳. دمای آدیاباتیک شعله

شکل (۵) تغییرات دمای آدیاباتیک شعله را در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف برای حالت افزودن ذرات ریز کربن ارائه می‌کند. شایان ذکر است مقادیر نسبت هم‌ارزی با در نظر گرفتن ترکیب ورودی متان، دوده و هوا تعیین شده است و برای همه نتایج این امر صادق است.

دمای احتراق را به همراه دارد. اما در حالت دوم، ذرات جامد کربن حضور ضعیف‌تری در واکنش‌ها داشته و پس از تجزیه حرارتی در ناحیه پیش‌گرم فعال شده و در واکنش‌ها شرکت می‌کنند [۱۴]. این امر موجب شده تا افزایش دما در مقایسه با حالت رفتار گازی ذرات کربن بسیار ناچیز باشد. شکل (۶) تغییرات دمای آدیاباتیک شعله را در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف برای حالت افزودن ذرات بزرگ‌تر کربن نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود در حالت افزودن ذرات بزرگ کربن، مقادیر بیشینه دما در نسبت هم‌ارزی کمتری رخ می‌دهد. با توجه به تعریف نسبت هم‌ارزی (معادله ۱۱)، حضور کربن بیشتر، حجم سوخت در ترکیب استوکیومتری (مقادیر F در نسبت $(A/F)_{sto}$) را افزایش و نسبت هوا به سوخت استوکیومتری $(A/F)_{sto}$ را کاهش می‌دهد. از این رو نسبت هم‌ارزی کلی در مقایسه با حالت بدون حضور کربن کاهش خواهد یافت. تقابل این دو اثر (کاهش نسبت هم‌ارزی و فعالیت پایین‌تر ذرات کربن) موجب شده تا مقادیر بیشینه دما در نسبت هم‌ارزی پایین‌تری رخ دهد.



شکل (۶): تغییرات دمای آدیاباتیک شعله در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف در حالت افزودن ذرات بزرگ کربن

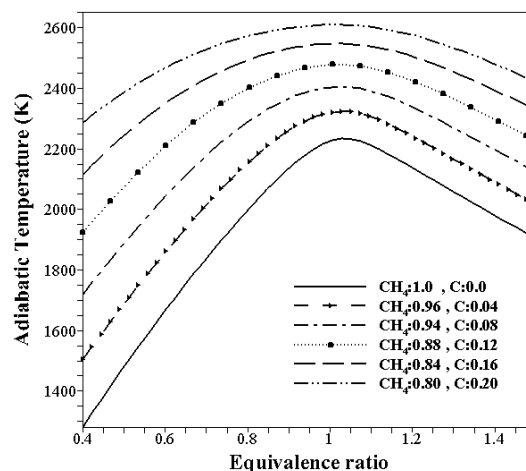
سشادری و همکاران [۱۴] با بررسی ساختار احتراق ذرات جامد در شعله‌های پیش‌آمیخته نشان دادند برای این مدل احتراق مقادیر نسبت هم‌ارزی مؤثر مقدار کمتری نسبت به مقادیر نسبت هم‌ارزی تئوری داشته و احتراق بر اساس نسبت هم‌ارزی مؤثر پیش می‌رود.

۳.۳. کسر مولی NO

شکل (۷) و شکل (۸) به ترتیب تغییرات کسر مولی NO در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف در حالت افزودن ذرات ریز و بزرگ کربن را نشان می‌دهد. با توجه به اهمیت مکانیزم تولید NO_x حرارتی نسبت به سایر مکانیزم‌های تولید این آلاینده [۱۶]، روند تغییرات این آلاینده

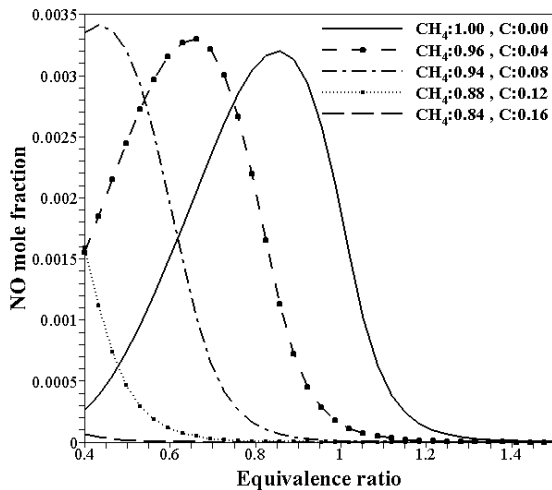
تغییرات دمای آدیاباتیک شعله در شکل (۵) نشان می‌دهد افزودن ذرات بسیار ریز کربن (فرض فاز گاز برای ذرات کربن) در تمامی نسبت هم‌ارزی‌های ممکن، باعث افزایش دمای احتراق متان خواهد شد. مقادیر بیشینه دما در درصدهای مختلف هم‌سوژی متان-کربن در نسبت هم‌ارزی ۱/۰۲ رخ می‌دهد.

در احتراق طبیعی متان (حالت ۱۰۰٪ متان و ۰٪ کربن) با افزایش نسبت هم‌ارزی تا مقدار ۱/۰۲ مقادیر دما افزایش می‌یابد و پس از آن، کاهش مقادیر دما مشاهده می‌شود. افزودن ذرات بزرگ کربن (فرض فاز جامد برای ذرات کربن) به احتراق مطابق شکل (۶) همان روند حالت احتراق طبیعی متان را دارا بوده با این تفاوت که مقادیر بیشینه دما در نسبت هم‌ارزی پایین‌تری رخ می‌دهد. این مهم موجب شده تا در نسبت هم‌ارزی‌های بالاتر از ۱/۰۲، هم‌سوژی متان و ذرات بزرگ کربن، دمای آدیاباتیک شعله را کاهش دهد و در نسبت هم‌ارزی‌های کمتر از ۱/۰۲ برای درصدهای مختلف کربن، افزایش دمای آدیاباتیک شعله مشاهده شود. نتایج راکول و رانگوال [۴] نیز نشان داد افزودن گرافیت (ذرات جامد کربن) در نسبت هم‌ارزی‌های کمتر از ۱ موجب افزایش دمای شعله خواهد شد.



شکل (۵): تغییرات دمای آدیاباتیک شعله در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف در حالت افزودن ذرات ریز کربن

بررسی مقادیر بیشینه دما در نسبت‌های مختلف ترکیب متان و ذرات بزرگ کربن نشان می‌دهد در ترکیب ۱۲٪ کربن و ۸۸٪ متان نسبت به حالت طبیعی احتراق متان مقدار بیشینه دما ۲/۲ درصد افزایش خواهد داشت؛ این مقدار برای حالت ذرات ریز کربن برابر با ۱۱ درصد است. در توصیف این پدیده، همان طور که اشاره شد، با فرض رفتار گازی برای ذرات کربن، گونه C در ۶ واکنش از ۷ واکنش جدول (۱) به‌عنوان یک واکنش‌دهنده، فعالیت کامل داشته و با افزایش درصد کربن سوخت، چگالی انرژی بیشتری را به احتراق اضافه می‌کند که افزایش قابل توجه

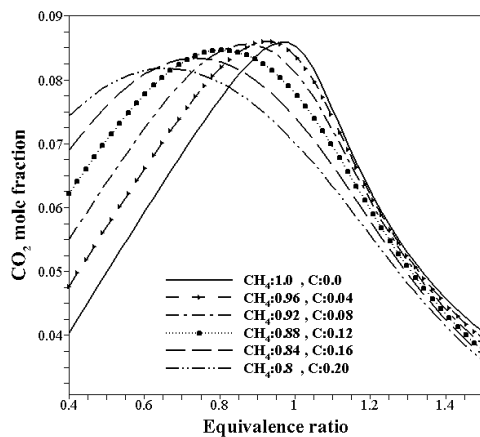


شکل (۸): تغییرات کسر مولی NO در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف در حالت افزودن ذرات بزرگ کربن

به‌طور معمول در کاربردهای مختلف احتراقی در صنایع، نسبت هم‌ارزی نزدیک ۱ و بالاتر برای احتراق در تجهیزات مورد استفاده قرار می‌گیرد. از این رو با توجه به روند تغییرات کسر مولی NO در شکل (۸)، هم‌سوزی متان و ذرات بزرگ کربن در این بازه موجب کاهش کسر مولی آلاینده NO خواهد شد که این مهم از نکات مثبت این هم‌سوزی به‌شمار می‌رود. نتایج آگولفولوس و فوکین [۸] نیز نشان‌دهنده تأثیر مثبت حضور ذرات گرافیت (کربن جامد) بر کاهش آلاینده NO است.

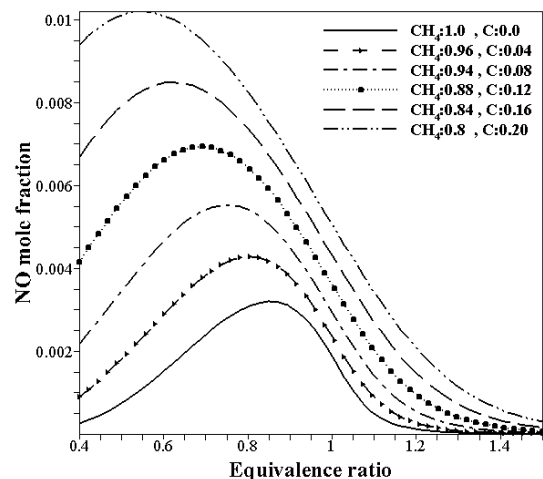
۴.۳. کسر مولی CO₂

تولید گونه CO₂ به‌عنوان یکی از محصولات نهایی احتراق به‌طور عمده توسط سه واکنش معرفی شده در جدول (۲) انجام می‌شود. این ۳ واکنش جزو واکنش‌هایی نهایی احتراق بوده و ماهیت گرمازا دارند؛ بدین معنا که با تشکیل دی‌اکسید کربن انرژی تشکیل شده به‌صورت گرما آزاد شده و منبع اصلی تولید انرژی احتراق نیز به‌شمار می‌روند.



شکل (۹): تغییرات کسر مولی CO₂ در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف در حالت افزودن ذرات ریز کربن

در اثر هم‌سوزی متان-کربن کاملاً مطابق با تغییرات دمای آدیباتیک شعله در اثر این هم‌سوزی است. مطابق شکل (۷) با افزایش درصد ذرات ریز کربن، مقادیر کسر مولی گونه NO در تمامی نسبت‌های هم‌ارزی افزایش خواهد یافت (مطابق تغییرات دمای آدیباتیک شعله در حالت افزودن ذرات ریز کربن). نکته قابل توجه در این نمودار مقادیر بیشینه NO است که در نسبت هم‌ارزی‌های کمتری نسبت به مقادیر بیشینه دمای آدیباتیک شعله رخ می‌دهد.



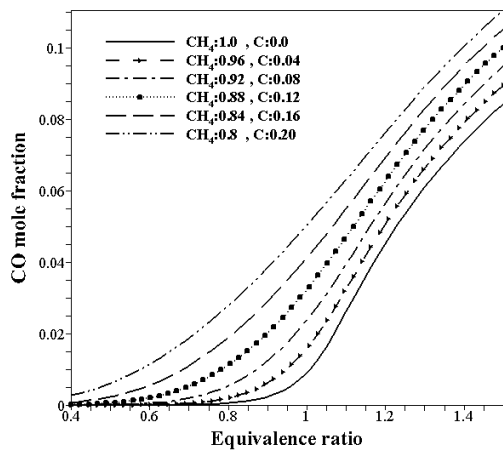
شکل (۷): تغییرات کسر مولی NO در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف در حالت افزودن ذرات ریز کربن

در سال‌های اخیر، احتراق پیش‌آمیخته رقیق یا کم‌سوخت به‌عنوان یک فناوری مؤثر برای کاهش NO سامانه‌های احتراق گاز طبیعی شناخته شده است [۱۶]. نتایج نشان می‌دهد در ترکیب‌های رقیق‌تر هوا به سوخت میزان تولید گونه NO کاهش می‌یابد. از سوی دیگر با غنی‌تر شدن ترکیب سوخت و هوا، میزان N₂ ورودی برای تولید NO کاهش می‌یابد (به‌دلیل کاهش مقادیر هوا در ترکیب ورودی). با افزودن کربن به احتراق متان، در عین ثبات میزان N₂ ورودی، ترکیب سوخت و هوا غنی‌تر شده، لذا مقادیر NO بیشینه در نسبت هم‌ارزی‌های پایین‌تری حادث می‌شود. از سوی دیگر، بررسی نمودار شکل (۸) نشان می‌دهد همان‌طور که بیشینه دمای آدیباتیک شعله در اثر هم‌سوزی متان و ذرات بزرگ کربن در نسبت هم‌ارزی کمتری رخ می‌دهد، نسبت هم‌ارزی بیشینه کسر مولی NO نیز به همان نسبت کاهش یافته و با توجه به افزایش نسبی بیشینه دما در ترکیب‌های مختلف هم‌سوزی متان-کربن افزایش مشابه در کسر مولی NO مشاهده می‌شود.

۵.۳. کسر مولی CO

شکل (۱۱) تغییرات کسر مولی CO در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف در حالت افزودن ذرات ریز کربن نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود افزودن ذرات ریز کربن در تمامی نسبت‌های هم‌ارزی موجب افزایش تولید آلاینده CO می‌شود.

مهم‌ترین واکنش زنجیره احتراق متان، واکنش شماره ۱۱ است که با ترکیب CO و رادیکال OH گونه نهایی CO₂ تولید می‌شود. این واکنش کنترل‌کننده اصلی کسر مولی دو گونه CO و CO₂ است. همان‌طور که در قسمت قبل اشاره شد، افزودن ذرات ریز کربن با افزایش دما موجب کاهش ثابت تعادلی واکنش ۱۱ شده و تولید دوباره واکنش‌دهنده‌ها از قبیل CO را فراهم می‌کند. لذا با تجزیه CO₂ در اثر افزودن ذرات ریز کربن، مطابق شکل (۱۱) تولید CO افزایش می‌یابد.



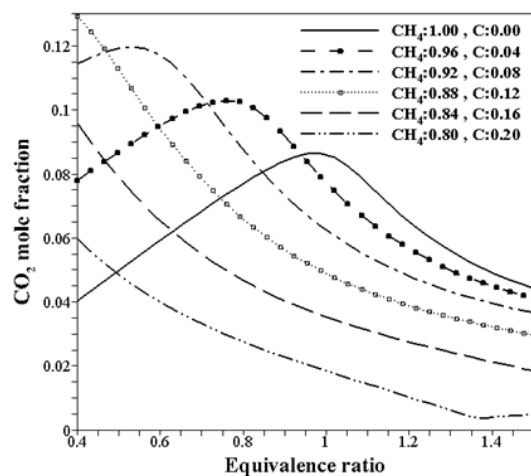
شکل (۱۱): تغییرات کسر مولی CO در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف در حالت افزودن ذرات ریز کربن با فاز گاز

شکل (۱۲) تغییرات کسر مولی CO در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف در حالت افزودن ذرات بزرگ کربن را نشان می‌دهد. با افزایش درصد کربن جامد از ۰ تا ۲۰ درصد در ترکیب متان-کربن، مقادیر کسر مولی CO افزایش می‌یابند. همچنین در هر نمودار با افزایش نسبت هم‌ارزی رشد کسر مولی CO مشاهده می‌شود. نکته قابل توجه در بررسی رفتار کسر مولی CO وجود یک مقدار بیشینه برای هر ترکیب مشخص است که در ترکیب ۸۰٪ متان و ۲۰٪ کربن در نسبت هم‌ارزی ۱/۳۸ و در ترکیب ۸۴٪ متان و ۱۶٪ گرافیت در نسبت هم‌ارزی ۱/۸۰ رخ می‌دهد. برای دیگر حالت‌های هم‌سوزی متان-گرافیت، این مقدار بیشینه در نسبت هم‌ارزی‌های بالاتر از ۲ رخ می‌دهد. در نتایج هاروارت و همکاران [۷] نیز وجود این نقطه بیشینه در تغییرات کسر مولی CO گزارش شده و اشاره شده که افزودن ذرات زغال‌سنگ ساییده شده موجب نزدیک شدن این نقطه به نسبت هم‌ارزی ۱ می‌شود. لذا هم‌سوزی متان و گرافیت موجب افزایش کسر مولی CO در ترکیب خروجی شده و همچنین مقدار بیشینه

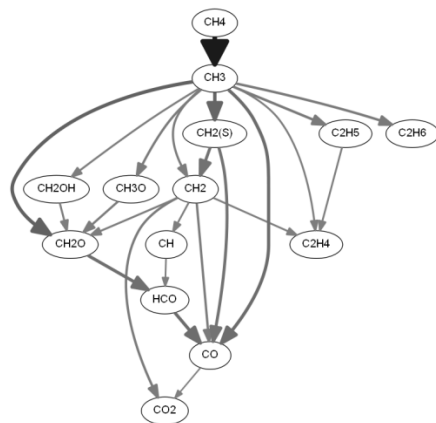
شکل (۹) تغییرات کسر مولی CO₂ در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف در حالت افزودن ذرات ریز کربن را نشان می‌دهد. مقایسه بین دو حالت احتراق طبیعی متان (حالت ۱۰۰٪ متان و ۰٪ کربن) و حالت ۹۶٪ متان و ۴٪ کربن نشان می‌دهد افزودن ذرات ریز کربن، با تغییر روند واکنش‌های زنجیره‌ای، در نسبت هم‌ارزی بالاتر از ۱ موجب کاهش تولید CO₂ شده و در نسبت هم‌ارزی کمتر از ۱ افزایش تولید دی‌اکسید کربن را به همراه دارد. اما با بررسی سایر حالت‌ها می‌توان نتیجه گرفت افزودن بیشتر ذرات کربن موجب کاهش تولید دی‌اکسید کربن در احتراق خواهد شد.

در واکنش‌های گرمازا با افزایش دما مقادیر ثابت تعادلی آن‌ها کاهش می‌یابد و واکنش به سمت تولید دوباره واکنش‌دهنده‌ها متمایل می‌شود [۱۷]. واکنش‌های تولید CO₂ نیز گرمازا بوده و با افزایش دما زمینه را برای تجزیه گونه CO₂ فراهم می‌کند. با توجه به افزایش دمای آدیاباتیک شعله در اثر افزودن ذرات ریز کربن، دی‌اکسید کربن در محیط دمابالا تجزیه شده و به تولید دوباره واکنش‌دهنده‌ها از قبیل CO ختم می‌شود. لذا افزودن ذرات ریز کربن با افزایش دمای واکنش، تولید دی‌اکسید کربن نهایی را کاهش می‌دهند.

شکل (۱۰) تغییرات کسر مولی CO₂ در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف در حالت افزودن ذرات بزرگ کربن نشان می‌دهد. مطابق آنچه در شکل (۹) مشاهده شد، افزودن کربن با تغییر روند واکنش‌های زنجیره‌ای، در نسب هم‌ارزی بالاتر از ۱ موجب کاهش تولید CO₂ شده و در نسب هم‌ارزی کمتر از ۱ افزایش تولید دی‌اکسید کربن را به همراه دارد. اما افزودن ذرات بزرگ کربن (فرض فاز جامد) تأثیر آن‌چنانی بر دمای واکنش نداشته و شرایط تجزیه دی‌اکسید کربن رخ نمی‌دهد. لذا در برآیند کلی افزودن ذرات بزرگ کربن با افزایش حضور کربن در واکنش تمایل به تولید CO₂ افزایش می‌یابد.

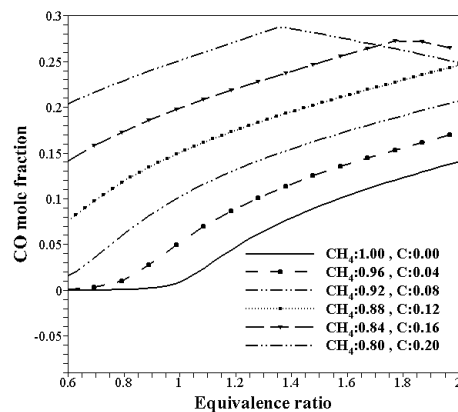


شکل (۱۰): تغییرات کسر مولی CO₂ در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف در حالت افزودن ذرات بزرگ کربن



شکل (۱۴): دیاگرام مسیر مربوط به گونه C در دمای ۱۷۰۰ درجه سانتی‌گراد و ترکیب ۱۰ درصد ذرات ریز کربن، ۹۰ درصد متان و هوای استوکیومتری

تولید این آلاینده را در نسبت هم‌ارزی پایین‌تری به ثمر می‌رساند.



شکل (۱۲): تغییرات کسر مولی CO در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف در حالت افزودن کربن با فاز جامد

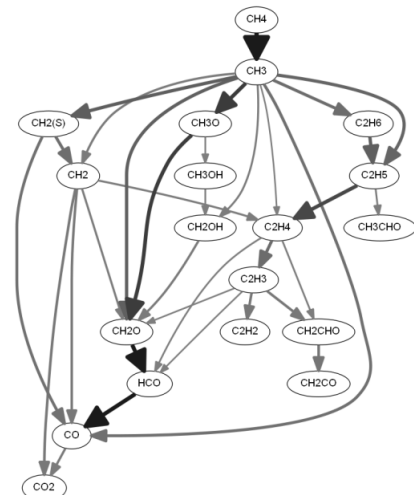
۴. نتیجه‌گیری

مدل‌سازی سینتیکی احتراق متان با افزودن کربن در دو حالت ذرات ریز (فرض رفتار گازی) و بزرگ کربن (فرض رفتار جامد) توسط کدهای کانترا و مکانیزم GRI30 در محیط پایتون انجام شد. نتایج این تحقیق نشان می‌دهد:

- افزودن ذرات ریز کربن به احتراق متان، با افزایش سطح واکنشی مکانیزم احتراق و تولید رادیکال‌های فعال باعث افزایش دمای آدیاباتیک شعله در تمامی نسبت‌های هم‌ارزی خواهد شد. به تبع آن رشد کسر مولی آلاینده NO نیز با افزودن ذرات ریز کربن مشاهده می‌شود.
- افزودن ذرات بزرگ کربن (فرض فاز جامد برای ذرات کربن) به احتراق همان روند حالت احتراق طبیعی متان را دارا بوده با این تفاوت که ذرات جامد کربن حضور ضعیف‌تری در واکنش‌ها داشته و پس از تجزیه حرارتی در ناحیه پیش‌گرم فعال شده و در واکنش‌ها شرکت می‌کنند. این امر موجب شده تا افزایش دما در مقایسه با حالت رفتار گازی ذرات کربن بسیار ناچیز باشد، اما مقادیر بیشینه دما با افزودن ذرات کربن در نسبت هم‌ارزی پایین‌تری رخ می‌دهد. این مهم موجب شده تا در نسبت هم‌ارزی‌های بالاتر از ۱/۰۲، هم‌سوزی متان و ذرات بزرگ کربن موجب کاهش دمای آدیاباتیک شعله و کاهش انتشار آلاینده NO شده و در نسبت هم‌ارزی‌های کمتر از ۱/۰۲ برای درصدهای مختلف کربن، افزایش دمای آدیاباتیک شعله و افزایش کسر مولی NO مشاهده شود.
- در واکنش‌های گرمازا با افزایش دما مقادیر ثابت تعادلی آن‌ها کاهش می‌یابد و واکنش به سمت تولید دوباره واکنش‌دهنده‌ها متمایل می‌شود. واکنش‌های تولید CO₂ نیز گرمازا بوده و با

۶.۳. نمودار مسیر کربن

بررسی روند تغییرات CO و CO₂ در نمودار مسیر تغییر گونه C برای حالت ۹۰٪ متان و ۱۰٪ ذرات ریز کربن در شکل (۱۳) و (۱۴) به ترتیب برای دمای عملکردی ۱۵۰۰ و ۱۷۰۰ درجه سانتی‌گراد ترسیم شده است. در این دیاگرام بر اساس کمیت‌های سینتیکی واکنش‌های زنجیره‌ای، همه مسیرهای موجود در فرایند تبدیل سوخت CH₄ به محصول نهایی CO₂ برای شرایط ذکر شده رسم شده است. ضخامت هر پیکان نشان‌دهنده اهمیت و شدت مسیر مورد نظر است. با مقایسه دو نمودار شکل‌های (۱۳) و (۱۴) می‌توان مشاهده کرد افزایش دما در مسیر تولید گونه CO بسیار تأثیرگذار بوده و روند آن را سریع‌تر نموده، اما روند تبدیل CO به CO₂ را تقلیل می‌دهد و دی‌اکسید کربن در دماهای بالا بیشتر از مسیر CH₂ (واکنش ۹) تولید می‌شود. این دو نمودار به درستی روند تأثیر افزایش دما در اثر افزودن ذرات ریز کربن را بر کاهش تولید دی‌اکسید کربن و افزایش تولید آلاینده CO نشان می‌دهد.



شکل (۱۳): دیاگرام مسیر مربوط به گونه C در دمای ۱۵۰۰ درجه سانتی‌گراد و ترکیب ۱۰ درصد ذرات ریز کربن، ۹۰ درصد متان و هوای استوکیومتری

افزایش دما و در نسب هم‌ارزی بالاتر از ۱ موجب کاهش تولید CO₂ شده و در نسب هم‌ارزی کمتر از ۱ افزایش تولید دی‌اکسید کربن را به همراه دارد.

افزایش دما زمینه را برای تجزیه گونه CO₂ فراهم می‌کند. افزودن ذرات ریز کربن با افزایش دمای آدیاباتیک شعله در اثر افزودن ذرات ریز کربن، موجب تجزیه دی‌اکسید کربن در محیط دما بالا و تولید گونه CO می‌شود.

• افزودن ذرات بزرگ کربن با تغییر روند واکنش‌های زنجیره‌ای و با افزایش حضور کربن در واکنش، تمایل به تولید CO را

فهرست علائم

تعداد گونه‌ها	N	تعداد عنصر k در فرمول شیمیایی گونه i	a_{ki}
دما (K)	T	مول کلی عنصر در واکنش (عدد ثابت ورودی)	b_k
ضریب گونه i زدر واکنش	θ'_{ji}	ثابت رفت واکنش	k_{fi}
تغییرات مقادیر گیبس در دمای مرجع گونه‌ها	ΔG^0	ثابت برگشت واکنش	k_{Ri}
		تعداد مول‌های گونه i	n_i

مراجع

- [1] Li, Q., et al., "Experimental Research of Particle Size and Size Dispersion on the Explosibility Characteristics of Coal Dust", Powder Technology, Vol. 292, pp. 290-297, 2016.
- [2] U.S. Mine Rescue Association, *Explosion Accident Summary*, <http://www.usmra.com/saxsewell/sago.htm>.
- [3] Centeno, F. R., et al., "Application of the WSGG Model for the Calculation of Gas-Soot Radiation in a Turbulent Non-Premixed Methane-Air Flame Inside a Cylindrical Combustion Chamber", International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 93, pp. 742-753, 2016.
- [4] Rockwell, S. R., Rangwala, A. S., "Influence of Coal Dust on Premixed Turbulent Methane-Air Flames", Combustion and Flame, Vol. 160, pp. 635-640, 2013.
- [5] Lee, M., Ranganathan, S., Rangwala, A. S., "Influence of the Reactant Temperature on Particle Entrained Laminar Methane-Air Premixed Flames", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 35, pp. 729-736, 2015.
- [6] Xie, Y., Raghavan, V., Rangwala, A. S., "Study of Interaction of Entrained Coal Dust Particles in Lean Methane-Air Premixed Flames", Combustion and Flame, Vol. 159, pp. 2449-2456, 2012.
- [7] Horvath, J. J., et al., "Spectroscopic Observations of Methane-Pulverized Coal Flames", Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Vol. 31, pp. 189-201, 1984.
- [8] Egolfopoulos, F. N., "Solid Fuel Burning in Steady, Strained, Premixed Flow Fields: The Graphite/Air/Methane System", International Journal of Energy Research, Vol. 24, pp. 1257-1276, 2000.
- [9] Eckhoff, R. K., "Does the Dust Explosion Risk Increase When Moving From μm -Particle Powders to Powders of nm-Particles", Journal of Loss Prevention in the Process Industries, Vol. 25, pp. 448-459, 2012.
- [10] Younessi-Sinaki, M., Matida, E. A., Hamdullahpur, F., "Kinetic Model of Homogeneous Thermal Decomposition of Methane and Ethane", International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 34, pp. 3710-3716, 2009.
- [11] Turns, S. R., *An Introduction to Combustion*, Vol. 287: McGraw-hill New York, 1996.
- [12] GRI-Mech 3.0 [Online]. Available: Web site <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech>
- [13] Lück, K. C., Tsatsaronis, G., "A Study of Flat Methane-Air Flames at Various Equivalence Ratios", Gasdynamics of Explosions and Reactive Systems, Vol. 6, pp. 467-475, 1980.
- [14] Seshadri, K., Berlad, A. L., Tangirala, V., "The Structure of Premixed Particle-Cloud Flames", Combustion and Flame, Vol. 89, pp. 333-342, 1992.
- [15] Ajilian Momtaz, A., Momahedi Heravi, H., "Experimental Study of Effects of Flue Gas Recirculation Technique on Maximum Flame Temperature and the NOx Emission of Gasoil and Biodiesel Combustion", Energy Engineering & Management, Vol. 2, pp. 38-45, 2012.
- [16] Dally, B. B., Riesmeier, E., Peters, N., "Effect of Fuel Mixture on Moderate and Intense Low Oxygen Dilution Combustion", Combustion and Flame, Vol. 137, pp. 418-431, 2004.
- [17] Winterbone, D. E., Turan, A., "Advanced Thermodynamics for

