

مطالعه عددی تاثیر تزریق دی اکسید کربن درون اکسیدکننده بر ساختار شعله در رژیم احتراقی بدون شعله

اسماعیل ابراهیمی فردویی^۱ و کیومرث مظاهری^{۲*}

۱- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، E.ebrahimifordoei@modares.ac.ir

۲- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، Kiumars@modares.ac.ir

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۱۲/۱۹، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۳۹۹/۰۲/۱۰، پذیرش: ۱۳۹۹/۰۳/۰۲)

چکیده: هدف از مطالعه حاضر بررسی تاثیر تزریق دی اکسید کربن درون اکسیدکننده در احتراق بدون شعله بر روی ساختار شعله با استفاده از شبیه سازی عددی کوره بدون شعله است. استفاده از مقادیر مختلف تزریق دی اکسید کربن منجر به تشکیل سه احتراق سوخت-هوا، اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن می شود. شبیه سازی های عددی با استفاده از نرم افزار اپن فوم انجام شده است. از مدل کی-پسیلون استاندارد، به منظور مدل سازی آشفستگی و از مدل فاز گسسته، به منظور مدل سازی تشعشعی، استفاده شده است. همچنین، به منظور اعتبارسنجی مدل احتراقی، از چهار مدل بر مبنای مدل مفهوم اتلاف گردابه استفاده شده است. بررسی ها بر روی توزیع دما، تاخیر در اشتعال، رنگ شعله و تغییرات رادیکال هیدروکسیل برای بررسی ساختار شعله انجام شده است. نتایج نشان می دهند که با انتقال از احتراق سوخت-هوا بدون شعله به احتراق اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن بدون شعله، که همراه با جایگزینی بخش یا تمام کسر جرمی نیتروژن با دی اکسید کربن است، بیشینه دمای شعله، به علت ظرفیت حرارتی بالاتر دی اکسید کربن و حضور فعال تر آن در واکنش های گرماگیر، کاهش می یابد. علاوه بر این، وجود دی اکسید کربن در شرایط احتراقی اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن سبب می شود تا فرایند اشتعال با تاخیر همراه شده و از غلظت رادیکال تحریک شده متیلایدین (CH^*)، که عامل انتشار نور مرئی است، به صورت قابل توجهی کاسته شود.

کلیدواژگان: احتراق بدون شعله، تزریق دی اکسید کربن، احتراق اکسیژن-غنی، احتراق سوخت-اکسیژن، ساختار شعله

مقدمه

کاهش انتشار آلاینده ها و گازهای گلخانه ای همراه با افزایش بازدهی در سیستم ها و فرایندهای تولید انرژی یکی از چالش های اصلی در ارتباط با احتراق سوخت های فسیلی بوده که قوانین سختگیرانه و معاهده های بین المللی مختلفی در ارتباط با آن وضع شده است. از این رو، در سال های اخیر استفاده و توسعه سیستم های احتراقی، که بتوانند به صورت همزمان افزایش بازدهی، کاهش انتشار آلاینده ها به ویژه ناکس و انتشار دی اکسید کربن به عنوان اصلی ترین گاز گلخانه ای را در پی داشته باشند، بسیار مورد توجه محققین بوده است. احتراق بدون شعله^۱ سیستم نوین احتراقی است که افزایش بازدهی حرارتی و کاهش چشمگیر انتشار آلاینده های ناکس و مونوکسید کربن را ممکن می سازد. از طرف دیگر، استفاده از احتراق اکسیژن-غنی^۲ و سوخت-اکسیژن^۳، به عنوان یکی از راهکارهای اصلی، به منظور جداسازی دی اکسید کربن از محصولات احتراقی برای دفن یا ذخیره سازی، مورد توجه قرار گرفته است [۱-۳]. با توجه به خصوصیات سیستم های احتراقی بدون شعله و اکسیژن-غنی یا

1. Flameless Combustion
2. Oxygen-enhanced Combustion
3. Oxy-Fuel Combustion

سوخت-اکسیژن، انتظار می‌رود که استفاده از سیستم مرکب احتراقی اکسیژن-غنی بدون شعله یا سوخت-اکسیژن بدون شعله بتواند منجر به سیستم احتراقی مطلوب از نظر انتشار آلاینده، گازهای گلخانه‌ای و همچنین بازدهی شود [۴].

با توجه به اینکه فناوری‌های احتراقی سوخت-هوا^۱، اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن بدون شعله نسبتاً جدیدند، مطالعات نسبتاً کمی در ارتباط با آن‌ها صورت گرفته است. از این رو، در سال‌های اخیر، به‌منظور گسترش و برطرف کردن چالش‌های مرتبط با این رژیم‌های احتراقی، توجه محققین به آن‌ها معطوف شده است. یکی از موضوعات اصلی در ارتباط با این سه رژیم احتراقی، شرایط تشکیل آن‌ها با استفاده از سوخت‌های مختلف است.

لی و همکارانش [۵] به بررسی تجربی احتراق سوخت-اکسیژن بدون شعله در یک کوره آزمایشگاهی پرداختند. آن‌ها در بررسی خود از سه سوخت متان، اتیلن و گاز مایع استفاده کردند. در کار آن‌ها اثرات نسبت هم‌ارزی و نوع سوخت مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج به‌دست‌آمده از بررسی‌های انجام‌شده روی نسبت هم‌ارزی نشان‌دهنده آن است که در شرایط مختلف احتراقی میزان نسبت هم‌ارزی لازم برای حصول احتراق بدون شعله متفاوت است. همچنین، با تزریق دی‌اکسیدکربن به داخل اکسیدکننده در سوخت گاز مایع و اتیلن، احتراق بدون شعله تشکیل نشده و برای تشکیل این رژیم احتراقی تحت شرایط استفاده از این دو سوخت لازم است تا تزریق دی‌اکسیدکربن درون سوخت انجام شود. موضوع مهم دیگر مربوط به مطالعه بر روی شرایط عملکردی سیستم احتراقی بدون شعله تحت شرایط استفاده از مخلوط‌های مختلف به‌عنوان اکسیدکننده است.

سانچز و همکارانش [۶] به بررسی تجربی احتراق اکسیژن-غنی بدون شعله در یک کوره مبدل سرخود^۲ با توان ۲۰ کیلووات پرداختند. در این مطالعه، احتراق به‌وسیله سوخت متان در چهار حالت اکسیژن-غنی و برای غلظت‌های ۲۱، ۲۵، ۳۰ و ۳۵ درصدی اکسیژن در سمت اکسیدکننده انجام گرفت. تاثیر استفاده از غلظت‌های مختلف اکسیژن بر توزیع دما و گونه‌ها، بازدهی حرارتی و تاثیر استفاده از مبدل حرارتی بر شرایط احتراقی در این مقاله بررسی شد. نتایج به‌دست‌آمده از اندازه‌گیری‌ها حاکی از آن است که با افزایش غلظت اکسیژن در ورودی، دمای بیشینه و دمای متوسط داخل کوره افزایش می‌یابد. افزایش دمای متوسط و بیشینه ناشی از افزایش میزان غلظت اکسیژن در ناحیه واکنشی نسبت به احتراق سوخت-هواست. همچنین، نتایج به‌دست‌آمده توسط سانچز نشان‌دهنده آن است که افزایش بیش از اندازه میزان بازچرخش محصولات احتراقی (بسیار بیشتر از حد لازم برای ایجاد احتراق اکسیژن-غنی بدون شعله) منجر به افت دمای حاصل از احتراق می‌شود.

در شرایط احتراق سوخت-اکسیژن بدون شعله، عدد دامکالر^۳ کمتر از احتراق سوخت-هوای بدون شعله بوده و در آن ناحیه واکنشی بیشتر به‌وسیله واکنش‌های شیمیایی کنترل می‌شود [۷]. این شرایط، زمانی که از هیدروژن کمتری در جریان سوخت و یا اکسیژن کمتری در جریان اکسیدکننده استفاده می‌شود، تشدید می‌شود [۷]. علاوه بر این، مطالعات انجام‌شده بیانگر این موضوع‌اند که محدودیت دست‌یابی به احتراق سوخت-اکسیژن بدون شعله نسبت به احتراق سوخت-هوای بدون شعله کمتر بوده و نیاز به نرخ رقیق‌سازی و میزان پیش‌گرمایش کمتری در احتراق سوخت-اکسیژن بدون شعله نسبت به احتراق سوخت-هوای بدون شعله وجود دارد [۸].

اغلب مطالعات انجام‌شده بر روی احتراق بدون شعله با استفاده از مخلوط‌های اکسیدکننده مختلف بر روی مشعل JHC^۴ انجام شده است. نتایج این مطالعات نشان می‌دهد که در حالت استفاده از محیط‌های مختلف اکسیدکننده، اندازه شعله در شرایط استفاده از دی‌اکسیدکربن بیشترین مقدار را داشته و پس از آن به‌ترتیب استفاده از نیتروژن و بخار آب منجر به تشکیل ناحیه واکنشی با حجم بیشتر می‌شود [۹، ۱۰]. دلیل تغییر در اندازه شعله اثرات فیزیکی و شیمیایی ناشی از تغییر محیط اکسیدکننده است. در این میان و با توجه به بررسی انجام‌شده توسط دای و همکارانش [۱۰]، عوامل فیزیکی نقش بسیار موثرتری نسبت به اثرات شیمیایی ایفا می‌کنند. در میان عوامل فیزیکی موثر بر اندازه شعله، چگالی مهم‌ترین تاثیر را دارد.

1. Air-fuel Combustion
2. Self-recuperative Furnace
3. Damköhler Number
4. Jet-in-hot-coflow Burner

همچنین، در شرایط احتراق سوخت-اکسیژن بدون شعله توزیع دمای یکنواخت‌تری نسبت به شرایط احتراق سوخت-هوای بدون شعله مشاهده شده است [۱۱،۷]. علاوه بر این، بیشینه دمای احتراق سوخت-اکسیژن بدون شعله مقدار بسیار کمتری نسبت به احتراق سوخت-هوای بدون شعله دارد. این موضوع از یک سو به علت ظرفیت حرارتی بالاتر بخار آب و دی‌اکسیدکربن است که در احتراق سوخت-اکسیژن مورد استفاده قرار می‌گیرند. از طرف دیگر استفاده از بخار آب و دی‌اکسیدکربن منجر به تغییر مسیر اکسیدشدن متان شده و سبب می‌شود تا توزیع دمایی یکنواخت‌تر با بیشینه دمایی پایین‌تر ایجاد شود [۱۱]. علاوه بر این، نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های عددی این مشعل نشان‌دهنده آن است که تشکیل رادیکال هیدروکسیل به شدت نسبت به گونه مورد استفاده، به منظور رقیق‌سازی اکسیژن، حساس است. با تغییر گونه رقیق‌ساز از نیتروژن به دی‌اکسیدکربن، اثرات شیمیایی ناشی از حضور دی‌اکسیدکربن در واکنش‌ها سبب می‌شود تا مقدار رادیکال هیدروکسیل تشکیل شده به صورت قابل توجهی در ناحیه احتراق بدون شعله کاهش یابد. از طرفی، بررسی‌ها نشان می‌دهند که اثرات فیزیکی استفاده از بخار آب به جای نیتروژن در هر دو ناحیه بدون شعله و همراه با شعله منجر به کاهش غلظت رادیکال هیدروکسیل می‌شود [۱۱].

مطالعات انجام‌شده با استفاده از مشعل JHC بر روی تاثیر گونه رقیق‌ساز بر میزان آلاینده ناکس تولیدشده نشان می‌دهد که در مقادیر کم جایگزینی دی‌اکسیدکربن با نیتروژن (کمتر از ۲۵ درصد کسر جرمی) اثر شیمیایی ناشی از تغییر اکسیدکننده عامل اصلی کاهش میزان ناکس منتشرشده است، در حالی که در مقادیر جایگزینی بالاتر دی‌اکسیدکربن، خواص فیزیکی نقش موثرتری در کاهش میزان آلاینده ناکس منتشرشده دارند [۱۲]. همچنین، مطالعات مختلف نشان می‌دهند که استفاده از دی‌اکسیدکربن به جای نیتروژن برای رقیق‌سازی اکسیژن منجر به کاهش بیش از ۵۰ درصدی میزان آلاینده ناکس منتشرشده می‌شود [۱۳،۱۴].

بررسی‌های عددی انجام‌شده بر روی کوره احتراق بدون شعله در مخلوط‌های اکسیدکننده مختلف بسیار محدود است. تو و همکاران [۱۵] به مطالعه عددی کوره احتراق بدون شعله، به منظور انتخاب بهترین رقیق‌ساز برای دستیابی به احتراق بدون شعله، پرداختند. این مطالعه با استفاده از کوره احتراق بدون شعله دانشگاه آدلاید^۱ و به کمک شبیه‌سازی دوبعدی متقارن، به منظور اعمال سینتیک‌های شیمیایی جزئی^۲، انجام پذیرفت. مطابق با شبیه‌سازی‌های صورت‌گرفته، در میان سه رقیق‌ساز نیتروژن، دی‌اکسیدکربن و بخار آب، دی‌اکسیدکربن واکنش‌پذیری بالاتری نسبت به نیتروژن و بخار آب دارد. همچنین، استفاده از دی‌اکسیدکربن، به عنوان رقیق‌ساز، گسترده‌ترین محدوده را برای تشکیل احتراق بدون شعله در اختیار قرار می‌دهد، در حالی که نیتروژن باریک‌ترین محدوده تشکیل احتراق بدون شعله را از نظر دمای ورودی و اختلاف بیشینه دمای احتراق با دمای ورودی فراهم می‌آورد.

تاثیر سطح رقیق‌سازی و پیش‌گرمایش خارجی اکسیدکننده تحت استفاده از مخلوط اکسیژن/دی‌اکسیدکربن با استفاده از کوره احتراقی بدون شعله توسط مقدسی و همکاران [۱۶] مورد بررسی قرار گرفت. در این مطالعه، با استفاده از واکنشگاه اختلاط ایدئال^۳ به بررسی اثرات استفاده از دی‌اکسیدکربن بر روی مسیرهای واکنشی احتراق سوخت-اکسیژن بدون شعله پرداخته شد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که افزایش دمای پیش‌گرمایش اکسیدکننده منجر به تاثیر قابل توجهی بر روی بیشینه دما در شرایط احتراقی سوخت-اکسیژن بدون شعله نمی‌شود. برخلاف انتظار، این افزایش دما منجر به کاهش در دمای گازهای خروجی از کوره نیز شده است. علاوه بر این، نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهند که افزایش سطح رقیق‌سازی به وسیله دی‌اکسیدکربن منجر به کاهش اختلاف میان بیشینه دمای داخل کوره و گازهای خروجی از کوره می‌شود که این موضوع بیانگر توزیع دمای یکنواخت‌تر در شرایط استفاده از دی‌اکسیدکربن به عنوان رقیق‌ساز است. همچنین، بررسی

1. Adelaide University

2. Detailed Chemical Mechanism

3. Well Stirred Reactor

مسیرهای واکنشی نشان می‌دهد که تحت شرایط استفاده از دی‌اکسیدکربن درون اکسیدکننده رادیکال هیدروژن سریع‌تر مصرف شده که این موضوع بیانگر تشکیل رژیم احتراق بدون شعله با نرخ‌های واکنشی کمتر است. مطالعاتی که تاکنون بر روی احتراق بدون شعله در شرایط اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن انجام شده است محدود بوده و عمدتاً بر روی توزیع دما و انتشار آلاینده‌ها با تکیه بر اثرات فیزیکی و شیمیایی ناشی از تزریق دی‌اکسیدکربن درون اکسیدکننده انجام شده است (تقریباً تمامی مطالعات انجام‌شده به حالت سوخت-اکسیژن تعلق دارد). از طرف دیگر، حجم زیادی از مطالعات انجام‌شده نیز بر روی دو مشعل JHC و DJHC^۱ است که در هر دو حالت از یک مشعل ثانویه، به‌منظور رقیق‌سازی و پیش‌گرمایش مخلوط احتراقی، برای دستیابی به احتراق بدون شعله، استفاده شده است. در هر دو مشعل نیز بخشی از شعله تشکیل‌شده شامل احتراق بدون شعله و بخشی شامل احتراق معمولی است. در مطالعه حاضر، کوره احتراق بدون شعله دانشگاه لیسبون^۲ برای مطالعه عددی انتخاب شده است. در این کوره، احتراق بدون شعله در سرتاسر کوره مشاهده شده است. به‌منظور پیش‌گرمایش و رقیق‌سازی مخلوط واکنشی، به‌عنوان دو شرط اساسی برای تشکیل احتراق بدون شعله، از بازچرخش شدید محصولات احتراقی با استفاده از تزریق سوخت و هوا با سرعت بالا به درون کوره و همچنین طراحی هندسه کوره استفاده شده است. موضوع اساسی در مطالعه حاضر، بحث بر روی ساختار شعله در سه شرایط احتراقی سوخت-هوا، اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن بدون شعله است که در مطالعات گذشته تنها برخی از خصوصیات ساختار شعله برای شرایط احتراقی سوخت-هوا بدون شعله مورد بررسی قرار گرفته است.

معادلات حاکم

ایجاد ناحیه واکنشی توزیع‌شده و انجام واکنش‌ها با نرخ کمتر، به‌علت رقیق‌سازی مخلوط واکنشی، دو تفاوت اصلی میان احتراق بدون شعله و احتراق معمولی است. این تفاوت‌ها سبب می‌شود تا نیاز به اصلاح مدل‌های احتراقی، که بر مبنای شرایط احتراق معمولی توسعه داده شده‌اند، باشد. روش‌های مختلفی برای مدل‌سازی برهمکنش میان آشفستگی-شیمی جریان وجود دارد که در میان آن‌ها روش‌های بر مبنای اختلاط آشفستگی با توجه به تناسب خوب میان دقت شبیه‌سازی‌ها و زمان محاسباتی به‌صورت گسترده در شبیه‌سازی‌های احتراقی به‌کار گرفته شده‌اند. همچنین، براساس مطالعات انجام‌شده توسط میناموتو^[۱۷] و دوان^[۱۸]، با استفاده از شبیه‌سازی مستقیم^۳، راکتور کاملاً مخلوط انطباق خوبی با شرایط احتراقی بدون شعله داشته و مدل‌های توسعه‌داده‌شده بر مبنای آن می‌توانند برای شبیه‌سازی این رژیم احتراقی مورد استفاده قرار گیرند. در میان مدل‌های بر مبنای اختلاط آشفته، تنها دو مدل مفهوم اتلاف گردابه^۴ و واکنشگاه نیمه‌مخلوط^۵ برای محاسبه نرخ‌های واکنشی، اثرات آشفستگی جریان و سینتیک‌های شیمیایی جزئی‌شده را به‌صورت همزمان لحاظ می‌کنند (استفاده از سینتیک‌های جزئی اهمیت بالایی در شبیه‌سازی احتراق بدون شعله دارد). در مطالعه حاضر، از مدل مفهوم اتلاف گردابه برای انجام شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است. از این رو، به‌منظور اعتبارسنجی مدل احتراقی، علاوه بر به‌کارگیری مدل اولیه مفهوم اتلاف گردابه توسعه‌داده‌شده توسط مگنسن و همکاران^[۱۹]، از دو مدل اصلاح‌شده توسط پرنته و همکاران^[۲۰] (اصلاح ضرایب مدل مفهوم اتلاف گردابه) و همچنین مدل توسعه‌داده‌شده توسط لواندوسکی و همکاران^[۲۱] (اصلاح فرمول‌بندی نرخ واکنش‌ها) نیز استفاده شده است. علاوه بر این، به‌منظور بهبود عملکرد دو مدل اصلاح‌شده توسط پرنته و لواندوسکی، مدل احتراقی ترکیبی از این دو مدل نیز برای انجام شبیه‌سازی‌های عددی، به‌عنوان مدل بهینه‌سازی‌شده مفهوم اتلاف گردابه، به‌کار برده شده است که در ادامه این بخش به بیان روابط حاکم بر هر یک از این مدل‌ها پرداخته خواهد شد.

1. Delft-jet-in-hot-coflow Burner
2. Flameless Furnace of Lisbon University
3. Direct Numerical Simulation (DNS)
4. Eddy Dissipation Concept
5. Partially Stirred Reactor

در مدل مفهوم اتلاف گردابه هر سلول محاسباتی به دو قسمت تقسیم‌بندی می‌شود: ریزساختارها، که واکنش‌های شیمیایی درون آن‌ها اتفاق می‌افتد و سیال پیرامونی، که در آن مخلوط احتراقی به صورت نسوخته باقی‌مانده و با محصولات احتراق مخلوط می‌شود. درواقع، فرض اصلی در مدل آبخاری توسعه داده شده توسط مگنسن وقوع واکنش‌های شیمیایی در نواحی به نام ریزساختارهاست که از مقیاس کولموگرو^۱ هستند. کسر جرمی ریزساختارها و مدت زمان اقامت سیال درون آن‌ها با استفاده از انرژی جنبشی آشفته‌گی و نرخ اضمحلال انرژی جنبشی به ترتیب مطابق با روابط (۱) و (۲) محاسبه می‌شوند.

$$\gamma_{\lambda} = \left(\frac{3C_{D2}}{4C_{D1}^2} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{v_{\varepsilon}}{k^2} \right)^{\frac{1}{4}} = C_{\gamma} \left(\frac{v_{\varepsilon}}{k^2} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (1)$$

$$\tau^* = \left(\frac{C_{D2}}{3} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{v}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} = C_{\tau} \left(\frac{v}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

که در آن C_{γ} و C_{τ} ضرایب مدل مفهوم اتلاف گردابه و C_{D1} و C_{D2} ثوابت این مدل‌اند. k و ε نیز به ترتیب بیانگر انرژی جنبشی آشفته‌گی و نرخ اضمحلال انرژی جنبشی آشفته‌گی‌اند. در این مدل، نرخ متوسط کلی واکنش‌ها از طریق معادله (۳) محاسبه می‌شود.

$$\bar{\omega}_i = \frac{\rho \gamma_{\lambda}^2 \chi}{\tau^* (1 - \gamma^* \chi)} (Y_i^* - Y_i^0) \quad (3)$$

در رابطه (۳)، ρ بیانگر چگالی، γ_{λ} کسر جرمی ریزساختار، χ کسر واکنشی، τ^* مدت زمان اقامت سیال درون واکنشگاه، Y_i^* کسر جرمی آلمین گونه درون واکنشگاه و Y_i^0 نیز بیانگر کسر جرمی گونه λ م در ورودی به واکنشگاه اختلاط ایدئال است. نسخه‌های مختلفی از مدل مفهوم اتلاف گردابه توسط مگنسن و همکارانش [۲۲-۲۴] ارائه شده است. سه نسخه اصلی، که به صورت گسترده در شبیه‌سازی جریان‌های واکنشی مورد استفاده قرار گرفته‌اند، در ارتباط با γ^* با یکدیگر اختلاف دارند. آخرین نسخه از مدل مفهوم اتلاف گردابه، در سال ۲۰۰۵، توسط مگنسن [۲۳] ارائه شده است. در این مدل، کسر جرمی ناحیه واکنشی $\gamma^* = \gamma_{\lambda}^3$ بوده و کسر واکنشی برابر با یک در نظر گرفته شده است. در مطالعه حاضر، این مدل EDC2005 نامیده شده است.

بررسی‌های گسترده‌ای بر روی اصلاح مدل مفهوم اتلاف گردابه برای استفاده در شبیه‌سازی احتراق بدون شعله انجام شده است. در بررسی‌های اولیه تمرکز بر روی تغییر ضرایب مدل مفهوم اتلاف گردابه (C_{γ} و C_{τ}) گذاشته شده بود. امینیان و همکاران [۲۵] و شعبانین و همکاران [۲۶] فرض وقوع واکنش‌ها در ریزساختارها را به علت تشکیل ناحیه واکنشی توزیع شده مغایر با شرایط حاکم بر رژیم احتراقی بدون شعله دانستند. از این رو، به بررسی تاثیر افزایش ضریب مقیاس مشخصه زمانی با افزایش ثابت آن از ۰/۴۰۸۲ به ۳ پرداختند. افزایش این ضریب منجر به کاهش نرخ واکنش‌ها شده و از این رو منجر می‌شود تا بیشینه دما و غلظت رادیکال هیدروکسیل و همچنین غلظت مونوکسیدکربن در نواحی دور از سر مشعل به صورت قابل توجهی کاهش یابد که این کاهش منجر به بهبود در عملکرد مدل احتراقی مفهوم اتلاف گردابه در شبیه‌سازی مشعل JHC شده است. از طرفی، بررسی‌ها نشان می‌دهد که رینولدز آشفته و عدد دامکالر در احتراق بدون شعله چندین مرتبه کوچک‌تر از احتراق معمولی‌اند. دی و همکاران [۲۷] نشان دادند که محدودیت حاکم بر ضرایب مدل مفهوم اتلاف گردابه توسعه داده شده توسط مگنسن شامل $Re_{\tau} > 64$ و $Da > 1$ است. به منظور افزایش دامنه کاربرد این مدل و رفع محدودیت آن برای کاربرد در احتراق بدون شعله، ایشان به بررسی تغییر C_{τ} از ۰/۴۰۸۲ به ۳ و تغییر C_{γ} از ۲/۱۳۱۷ به ۱ در مشعل احتراق بدون شعله پرداختند. نتایج به دست آمده از این مطالعه نشان می‌دهد که کاهش در ضریب C_{γ} منجر به کاهش در نرخ واکنش‌ها شده و این ضریب نسبت به C_{τ} تاثیر قابل توجهی در بهبود عملکرد مدل مفهوم اتلاف گردابه در شبیه‌سازی احتراق بدون شعله دارد. در مطالعه انجام شده توسط مردانی [۲۸]، تغییر در ضرایب مدل مفهوم اتلاف گردابه بر مبنای ثابت بودن ضریب C_{D1} ، به علت محاسبه آن از

1. Kolmogorov Scale

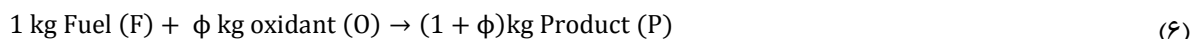
طریق مدل آشفستگی و تغییر در ضریب C_{D2} ، انجام شد. نتایج به دست آمده از این بررسی نشان می دهد که کاهش C_t از 0.4082 به 0.0893 و کاهش C_γ از $2/1317$ به 1 منجر به بهبود عملکرد مدل مفهوم اتلاف گردابه به صورت قابل توجهی می شود. پس از بررسی های بیان شده، پرنه و همکاران [20] به محاسبه ضرایب C_t و C_γ به صورت کمیت های موضعی از میدان جریان پرداختند. اساس توسعه این مدل بر مبنای وجود ناحیه واکنشی گسترده و آشفستگی جریان با شدت بالاست. براساس این مدل، سرعت مشخصه ریزساختارها براساس سرعت شعله آشفته محاسبه شده است. در این مدل، با توجه به فیزیک حاکم بر احتراق بدون شعله، سرعت شعله آشفته براساس سرعت شعله آرام، که مشخصه احتراق پیش آمیخته است، محاسبه می شود. با توجه به مرتبه بالایی از شرایط پیش آمیختگی در احتراق بدون شعله این فرض مناسب در نظر گرفته شده است. این مدل، که در مطالعه حاضر نیز به عنوان یکی از مدل های به کار گرفته شده به منظور اعتبارسنجی نتایج کوره احتراق بدون شعله استفاده شده است، EDC2016 نامیده می شود. در این مدل، ضرایب C_t و C_γ مطابق با روابط (4) و (5) محاسبه می شوند.

$$C_t = \frac{0.05774}{Da\sqrt{Re_t + 1}} \quad (4)$$

$$C_\gamma = 0.5\sqrt{Da(Re_t + 1)} \quad (5)$$

در روابط بالا، $Da = \sqrt{\frac{v}{\epsilon}}$ و $Re_t = \sqrt{\frac{k}{v\epsilon}}$ است. همچنین، در مدل EDC2016 نیز کسر جرمی ناحیه واکنشی $\gamma^* = \gamma_\lambda^3$ و کسر واکنشی برابر با یک در نظر گرفته شده است.

در مطالعه انجام شده توسط لواندوسکی و همکاران [21]، به اصلاح فرمول محاسبه نرخ واکنش ها تحت ضرایب ثابت مدل مفهوم اتلاف گردابه و اصلاح کسر واکنشی (χ) با استفاده از تابع موضعی بر حسب کسر مولی گونه های احتراقی پرداخته شد. در این مدل با در نظر گرفتن واکنشی مشابه با معادله (6) به محاسبه کسر واکنشی به صورت رابطه (7) پرداخته شده است. مدل توسعه داده شده توسط ایشان در مطالعه حاضر EDC2018 نامیده شده است. در این مدل، مقادیر ضرایب C_t و C_γ به ترتیب برابر با 0.4082 و $2/1317$ مطابق با مقادیر پیشنهاد شده به وسیله مگنسن در نظر گرفته شده است. همچنین، در این مدل کسر واکنشی از رابطه $\gamma^* = \frac{1-\chi}{\chi}$ محاسبه می شود.



$$\chi = X_1 X_2 X_3 \quad (7)$$

$$X_1 = \frac{(Y_{\min} + Y_P)^2}{(Y_F + Y_P)(Y_O + Y_P)} \quad (8)$$

$$X_2 = \min \left[\frac{Y_P}{Y_\lambda(Y_{\min} + Y_P)}, 1 \right] \quad (9)$$

$$X_3 = \min \left[\frac{Y_\lambda(Y_{\min} + Y_P)}{Y_{\min}}, 1 \right] \quad (10)$$

$$Y_F = \frac{\bar{Y}_F}{1}, Y_O = \frac{\bar{Y}_O}{\phi}, Y_P = \frac{\bar{Y}_P}{1 + \phi} \quad (11)$$

با توجه به بررسی های انجام شده در مطالعه پرنه و همکاران [20] و همچنین لواندوسکی و همکاران [21]، در شبیه سازی مشعل احتراق بدون شعله، با وجود عملکرد بسیار بهتر دو مدل در پیش بینی دما و توزیع گونه ها، همچنان نرخ های واکنشی در هر دو مدل نسبت به مقادیر واقعی اختلاف قابل توجهی دارند. از این رو، در مطالعه حاضر، به منظور بهره مندی از بهبود نتایج به دست آمده به وسیله دو مدل EDC2016 و EDC2018 و به منظور داشتن مدلی متناسب با فیزیک حاکم بر احتراق بدون شعله، استفاده از ترکیب دو مدل EDC2016 و EDC2018 پیشنهاد شده است. بدین ترتیب در مدل اصلاحی مطالعه حاضر به صورت همزمان ضرایب مدل مفهوم اتلاف گردابه و فرمول بندی نرخ واکنشی اصلاح شده است. در این مدل نیز $\gamma^* = \gamma_\lambda^3$ در نظر گرفته شده است.

هندسه کوره و شرایط مرزی حاکم بر آن

از کوره احتراق بدون شعله ساخته شده در دانشگاه لیسبون پرتغال [۳]، به منظور انجام شبیه سازی ها، استفاده شده است. همان طور که در شکل ۱ مشاهده می شود، این کوره دارای محفظه ای استوانه ای شکل به قطر ۱۵۰ میلی متر و طول ۳۰۰ میلی متر است. به منظور بازچرخش محصولات احتراقی (برای پیش گرمایش و رقیق سازی مخلوط احتراقی برای تشکیل احتراق بدون شعله)، در انتهای محفظه سطح مقطع کوره با استفاده از یک نازل همگرا به طول ۵۰ میلی متر به تدریج کاهش می یابد. محصولات احتراق نیز از طریق دودکشی به طول ۱۵۰ و قطر ۸۵ میلی متر از انتهای کوره خارج می شوند. ورودی سوخت و هوا به درون کوره نیز مطابق با شکل ۱ است. سوخت ورودی (متان خالص) از طریق مجرای میانی به قطر ۴ میلی متر و اکسیدکننده (هوا) از طریق مجرای حلقوی پیرامون لوله سوخت با قطر داخلی ۶ میلی متر و قطر خارجی ۱۵ میلی متر به درون کوره وارد می شوند. طول لوله های ورودی سوخت و هوا برابر با ۲۱ میلی متر گزارش شده است.

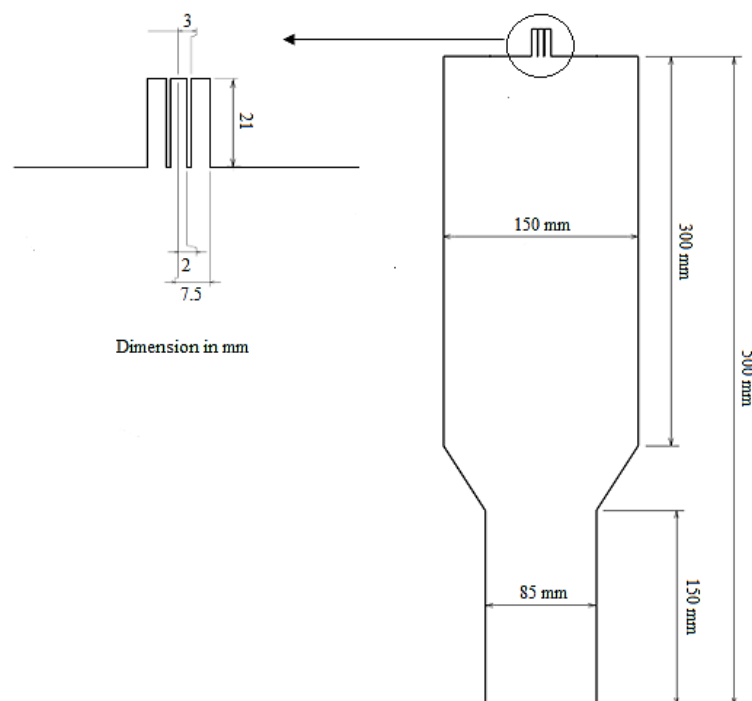


Figure 1- Furnace geometry and dimensions

شکل ۱- هندسه کوره و ابعاد آن

نتایج مربوط به توزیع دما و گونه ها برای کوره احتراق بدون شعله مورد نظر در دو حالت مورد بررسی قرار گرفته است. در حالت اول سوخت و هوای ورودی به ترتیب با سرعت های ۲۴/۴ و ۱۰۴ متر بر ثانیه به درون محفظه احتراق وارد می شوند. در این حالت، حرارت ورودی به کوره ۱۰ کیلووات بوده و دمای سوخت و هوای ورودی به ترتیب برابر با ۲۹۳ و ۷۷۳ کلوین اند. دمای دیواره کوره نیز توزیعی تقریباً یکنواخت با مقدار ۱۱۷۳ کلوین داشته که از این مقدار به عنوان شرط مرزی دمایی برای دیواره محفظه استفاده شده است. حالت دوم مربوط به شرایطی است که در آن سوخت و هوا به ترتیب با سرعت ۳۸/۱ و ۱۵۵ متر بر ثانیه به درون کوره وارد می شوند. با افزایش دبی سوخت ورودی، حرارت ورودی به ۱۵/۷ کیلووات افزایش یافته و دمای سوخت و هوای ورودی به ترتیب برابر با ۲۹۳ و ۹۷۳ کلوین اند. در این حالت نیز دمای دیواره محفظه احتراق تقریباً ثابت و برابر با ۱۲۶۱ کلوین گزارش شده است که از این مقدار به منظور اعمال شرط مرزی حرارتی بر دیواره محفظه احتراق استفاده شده است. ذکر این نکته لازم است که در مطالعه انجام شده بر روی کوره احتراق بدون شعله، اعتبارسنجی حلگر و انتخاب مدل

احتراقی تحت شرایط کوره با توان حرارتی پایین تر انجام شده است، اما، به منظور بررسی تاثیر تزریق دی اکسیدکربن درون اکسیدکننده، شرایط بیان شده برای کوره با توان حرارتی بالاتر مد نظر قرار گرفته است. علت این موضوع خاموشی شعله در شرایط استفاده از مقادیر کسر مولی بالای دی اکسیدکربن درون اکسیدکننده تحت شرایط کوره با توان حرارتی پایین است. سایر شرایط مرزی حاکم بر کوره احتراق بدون شعله در شکل ۲ نشان داده شده است. با توجه به هندسه استوانه‌ای شکل کوره که منجر به تقارن هندسی در کوره شده، برای انجام شبیه‌سازی‌های عددی از یک قطاع ۵ درجه استفاده شده است که در این حالت، برای خط مرکزی قطاع، شرط مرزی محور تقارن به کار برده شده است. همچنین، با توجه به بررسی تجربی انجام شده، از شرط مرزی عایق حرارتی برای دیواره‌های ورودی سوخت و هوا، دیواره قسمت نازلی شکل کوره و همچنین دیواره دودکش استفاده شده است. برای سرعت نیز از شرط مرزی عدم لغزش بر روی دیواره‌ها استفاده شده است. با توجه به تخلیه محصولات احتراق به محیط، برای خروجی کوره شرط مرزی فشار محیط در نظر گرفته شده است.

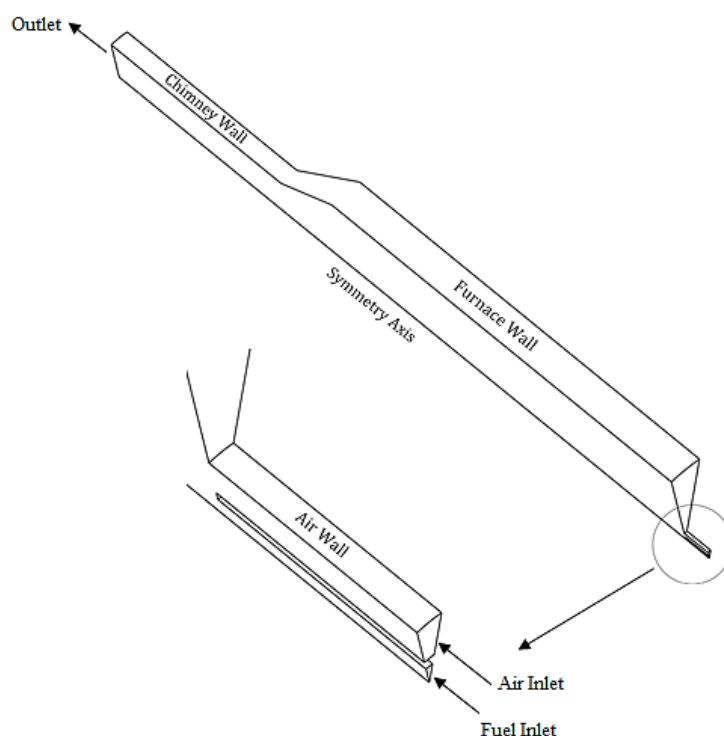


Figure 2- Flameless furnace boundary condition

شکل ۲- شرایط مرزی حاکم بر کوره بدون شعله

روش حل عددی

به منظور انجام شبیه‌سازی عددی کوره احتراق بدون شعله، از نرم‌افزار متن‌باز اپن‌فوم استفاده شده است. در شبیه‌سازی‌ها از الگوریتم پیمپل^۱، به منظور برطرف کردن کوپلینگ میان سرعت و فشار، استفاده شده است. الگوریتم پیمپل ترکیبی از الگوریتم‌های پیزو^۲ و سیمپل^۳ بوده که در آن از اصلاح داخلی و خارجی برای معادله تصحیح فشار استفاده می‌شود. به منظور گسسته‌سازی ترم‌های جابه‌جایی در معادلات مختلف، از روش آپویند^۴ مرتبه دوم استفاده شده است. معیار همگرایی حل

1. PIMPLE Algorithm
2. PISO Algorithm
3. SIMPLE Algorithm
4. Upwind Scheme

رسیدن باقی مانده تمامی متغیرها به کمتر از 10^{-7} در هر گام زمانی و همچنین تغییرات دمایی کمتر از یک کلوین در خروجی محدوده حل عددی، در مدت زمان ۵/۰ ثانیه، در نظر گرفته شده است. به منظور دستیابی به نتایجی قابل اتکاتر، به خصوص در ناحیه بازچرخشی کوره، از چهار مدل احتراقی EDC2005، EDC2016، EDC2018 و EDC2020، به منظور انتخاب بهترین مدل احتراقی استفاده شده است. همچنین، با توجه به مطالعات انجام شده توسط ریولا و همکاران [۲۹] بر روی بررسی بهترین مدل آشفستگی در شبیه سازی کوره حاضر، از مدل آشفستگی کی-اِپسیلون استاندارد^۱، به منظور محاسبه تنش های رینولدز در معادله تکانه، استفاده شده است. سینتیک شیمیایی GRI 2.11 با ۴۹ گونه و ۲۷۷ واکنش با توجه به عملکرد مناسب در پیش بینی توزیع دما و گونه ها در احتراق بدون شعله مورد استفاده قرار گرفته است [۳۰]. از مدل تشعشعی فاز گسسته، به منظور مدل سازی عبارت چشمه انتقال حرارت تشعشعی (با توجه به اهمیت انتقال حرارت تشعشعی در احتراق سوخت-اکسیژن و اکسیژن-غنی [۳۱])، در معادله انرژی استفاده شده است. همچنین، به منظور محاسبه ضرایب جذب و گسیل، از مدل جمع وزنی گازهای خاکستری^۲ در شش محدوده طول موج مختلف مطابق با مطالعه انجام شده در مرجع [۱۴] استفاده شده است. ضرایب در نظر گرفته شده برای گازهای غیر خاکستری مطابق با جدول ۱ است.

جدول ۱- ضرایب مربوط به شرایط تشعشعی گاز غیر خاکستری

Table 1- The coefficients of non-gray gas radiation conditions

Amount of CO ₂ Injection (%)	Wave Length (μm)					
	0.0-2.5	2.5-3.0	3.0-4.0	4.0-5.0	5.0-9.0	9.0-20
25	0	0.75	0	0.78	0	0.72
50	0	0.79	0	0.82	0	0.75
75	0	0.82	0	0.85	0	0.78

اعتبارسنجی حلگر و مدل احتراقی

در این قسمت، به اعتبارسنجی نتایج به دست آمده از حل عددی کوره احتراق بدون شعله و انتخاب مدل احتراقی مناسب به منظور انجام شبیه سازی های عددی پرداخته شده است. همان گونه که پیشتر بیان شد، از چهار مدل احتراقی EDC2005، EDC2016، EDC2018 و EDC2020، به منظور انتخاب مناسب ترین مدل احتراقی تحت شرایط احتراق بدون شعله، استفاده شده است. مطابق با شکل ۳، اعتبارسنجی نتایج به دست آمده با استفاده از توزیع شعاعی دما و گونه ها در فواصل محوری ۹۰، ۱۵۰ و ۲۱۰ میلی متری انجام شده است. همچنین، محفظه احتراق مطابق با شکل ۳ به دو قسمت ناحیه بازچرخشی و ناحیه نزدیک به خط مرکزی برای تحلیل نتایج تقسیم بندی شده است.

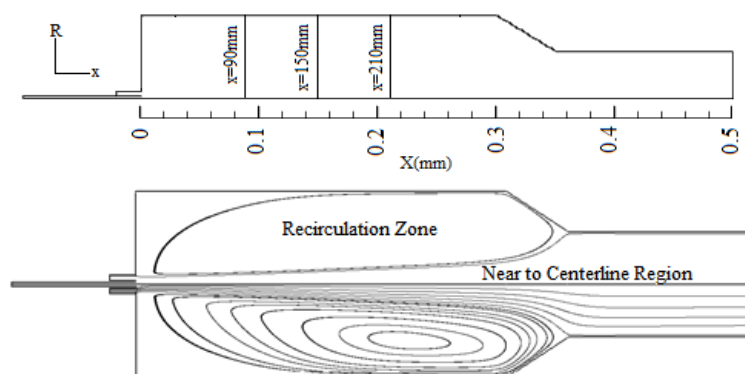


Figure 3- Streamlines into the furnace and different axial distances for validation of solver and combustion model results

شکل ۳- خطوط جریان درون کوره و فواصل محوری برای اعتبارسنجی نتایج حلگر و مدل احتراقی

1. Standard k-ε
2. Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model (WSGGM)

در شکل‌های ۴ و ۵ نتایج مربوط به توزیع شعاعی دما و کسر حجمی خشک گونه‌های اکسیژن و دی‌اکسیدکربن در فواصل نشان داده شده در شکل ۳ با استفاده از مدل‌های احتراقی مختلف مفهوم اتلاف گردابه و همچنین مطالعه عددی انجام شده توسط ربولا و همکاران [۲۹] نشان داده شده است. به طور کلی، با توجه به نتایج به دست آمده، می‌توان گفت که مدل احتراقی مفهوم اتلاف گردابه در پیش‌بینی توزیع دما و گونه‌های اصلی دقت قابل قبولی داشته و از این رو این مدل توانایی قابل قبولی در پیش‌بینی مشخصات کلی احتراق بدون شعله دارد. همان‌گونه که در شکل‌های ۴ و ۵ مشخص است، مدل احتراقی EDC2005 منجر به پیش‌بینی توزیع دما، مصرف اکسیژن و تولید دی‌اکسیدکربن بیش از مقادیر به دست آمده از داده‌های تجربی می‌شود. در این مدل، از ضرایب پیشنهاد شده توسط مگسن برای محاسبه ضرایب مدل مفهوم اتلاف گردابه استفاده شده است. این ضرایب، با توجه به شرایط حاکم بر احتراق معمولی و زمانی که واکنش‌های شیمیایی در ناحیه باریکی اتفاق می‌افتند، بالاترین دقت را ارائه می‌دهند.

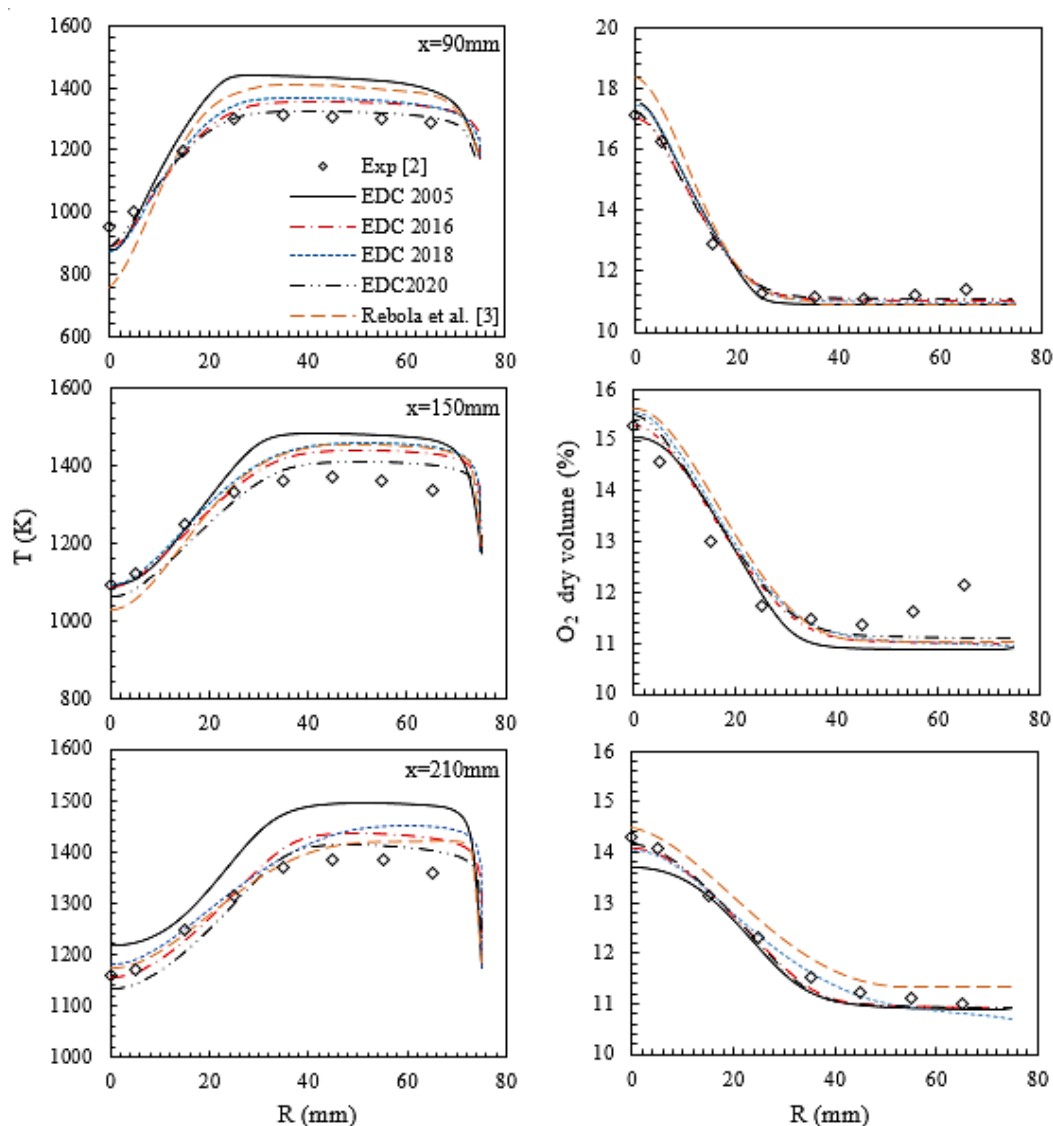


Figure 4- Variations of temperature and oxygen dry volume fraction for the eddy dissipation concept models in 90, 150 and 210mm axial distances

شکل ۴- تغییرات دما و کسر حجمی خشک اکسیژن برای مدل‌های مفهوم اتلاف گردابه در فواصل محوری ۹۰، ۱۵۰ و ۲۱۰ میلی‌متری

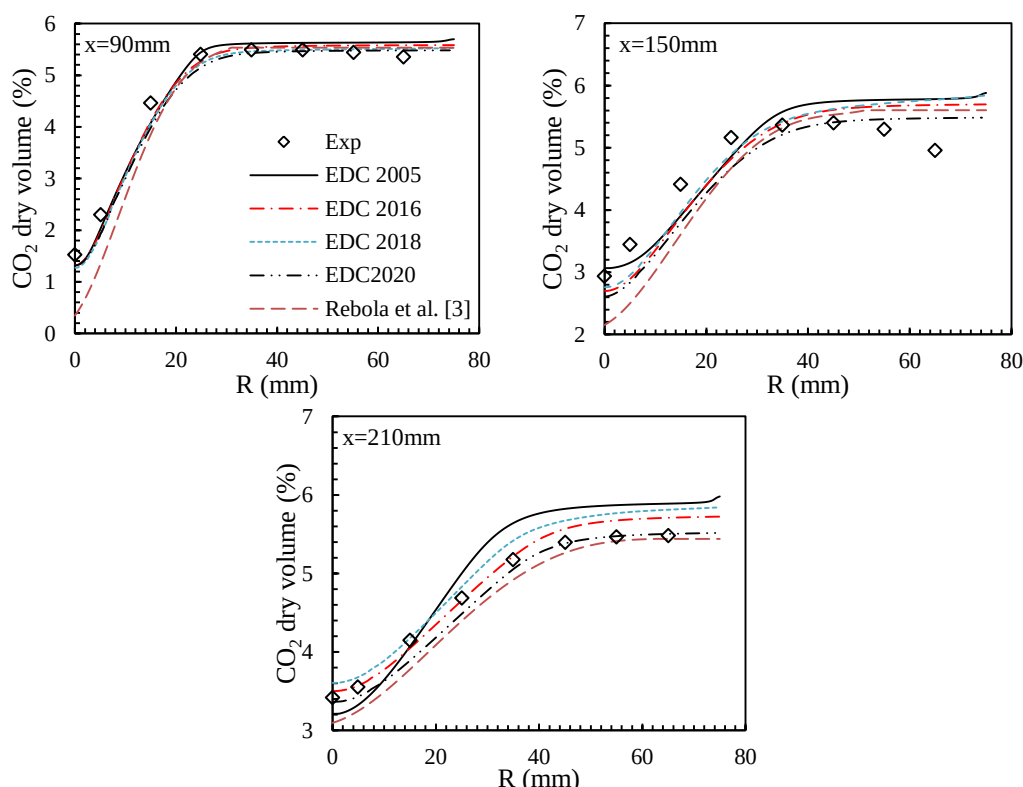


Figure 5- Variations of carbon dioxide dry volume fraction for eddy dissipation concept models in 90, 150 and 210mm axial distances
 شکل ۵- تغییرات کسر حجمی خشک دی اکسیدکربن برای مدل های مفهوم اتلاف گردابه در فواصل محوری ۹۰، ۱۵۰ و ۲۱۰ میلی متری

با توجه به اینکه در احتراق بدون شعله از میزان اکسیژن موجود در مخلوط احتراقی در ناحیه واکنشی کاسته می شود، نرخ واکنش های شیمیایی کاهش یافته و ناحیه واکنشی توزیع شده تشکیل می شود. این تفاوت فیزیکی از یک طرف و از طرف دیگر محدودیت فرمول بندی مدل احتراقی مفهوم اتلاف گردابه (استفاده از کسر واکنشی برابر یک در شرایط احتراق بدون شعله، که نسبت هم ارزی مخلوط واکنشی در آن بسیار کوچک تر از یک بوده و احتراق ناکامل وجود دارد، منجر به خطای ناشی از فرمول بندی می شود) در شبیه سازی جریان های واکنشی با عدد رینولدز آشفته و عدد دامکالر کوچک سبب می شود تا نرخ واکنشی محاسبه شده به وسیله مدل EDC2005 بیش از مقدار واقعی آن بوده و همراه با خطای قابل توجهی باشد.

اصلاح ضرایب با استفاده از توابع موضعی در مدل EDC2016 منجر به بهبود عملکرد کلی مدل احتراقی مفهوم اتلاف گردابه در محاسبه دما و کسر مولی گونه ها می شود. با توجه به اینکه توابع موضعی تعریف شده برحسب اعداد بدون بعد رینولدز آشفته و دامکالر بوده و این مقادیر در شرایط احتراق بدون شعله نسبت به احتراق معمولی در محدوده میدان حل عددی کوچک ترند، مقادیر ضرایب C_T و C_γ به ترتیب افزایش و کاهش می یابند و بدین ترتیب منجر به کاهش در نرخ واکنش های شیمیایی می شوند. کاهش در نرخ واکنش ها منجر به کمتر شدن مقادیر دمایی و همچنین کاهش میزان اکسیژن مصرف شده نسبت به مدل مفهوم اتلاف گردابه توسعه داده شده توسط مگنسن می شود. مطابق با شکل های ۴ و ۵ در هر دو ناحیه بازچرخشی و ناحیه نزدیک به خط مرکزی کوره نتایج توزیع دما و گونه ها نسبت به مدل EDC2005 تطابق بیشتری با داده های تجربی دارد. با این وجود و در توافق با نتایج به دست آمده در بررسی انجام شده با استفاده از این مدل بر روی مشعل JHC [۲۰]، مقادیر دمایی در ناحیه بازچرخشی، به عنوان ناحیه اصلی در کوره احتراق بدون شعله، بیش از مقادیر تجربی است.

مدل احتراقی دیگر مورد بررسی در این قسمت مدل EDC2018 است. در این مدل، با استفاده از تابع موضعی براساس کسر جرمی گونه ها به محاسبه کسر واکنشی پرداخته می شود. با توجه به این موضوع نرخ واکنش ها در این مدل نسبت به مدل

EDC2005 کمتر است. همین موضوع سبب شده تا مقادیر دما و کسر حجمی خشک گونه‌های پیش‌بینی شده با استفاده از این مدل مقادیر کمتری نسبت به مدل EDC2005 داشته باشد. نتایج به‌دست‌آمده توسط این مدل در ناحیه نزدیک به خط مرکزی کوره در فواصل محوری مختلف از تطابق بسیار خوبی با نتایج تجربی برخوردارند. با وجود این، نتایج به‌دست‌آمده در ناحیه بازچرخشی برای دما و گونه‌های اکسیژن و دی‌اکسیدکربن خطای قابل توجهی در فواصل محوری مختلف دارد. این موضوع به علت نرخ‌های واکنشی بالاتر محاسبه شده با استفاده از این مدل نسبت به مقادیر واقعی است.

با توجه به پیش‌بینی بالاتر مقادیر دمایی و همچنین مصرف و تولید گونه‌های اکسیژن و دی‌اکسیدکربن با استفاده از مدل‌های اصلاح شده EDC2016 و EDC2018، استفاده از اصلاح همزمان فرمول‌بندی مدل مفهوم اتلاف گردابه و همچنین اصلاح ضرایب آن، به منظور دستیابی به نتایج دقیق‌تر، پیشنهاد شده است. نتایج حاصل از این مدل، که ترکیبی از دو مدل EDC2016 و EDC2018 بوده و در مطالعه حاضر EDC2020 نام دارد، در شکل‌های ۴ و ۵ نشان داده شده است. در این مدل نرخ واکنش‌های شیمیایی نسبت به هر دو مدل اصلاح شده بیان شده کمتر است که این موضوع همراه با کاهش دما در فواصل محوری مختلف و همچنین مصرف کمتر اکسیژن و تولید کمتر دی‌اکسیدکربن در نتایج به‌دست‌آمده مشخص است.

مقایسه میان نتایج مدل‌های مختلف مفهوم اتلاف گردابه با نتایج حاصل از بررسی ربولا و همکاران [۲۹] که در آن از مدل مفهوم اتلاف گردابه با استفاده از ضرایب در نظر گرفته شده به وسیله مگنسن انجام شده است نیز بیانگر آن است که نتایج حاصل از مدل مفهوم اتلاف گردابه اصلاح شده در مطالعه حاضر EDC2020 به‌ویژه در ناحیه بازچرخشی برای دما، توزیع اکسیژن و دی‌اکسیدکربن از دقت بسیار بالاتری برخوردار است.

اعتبارسنجی حلگر و سینتیک شیمیایی در محاسبات سینتیکی با استفاده از راکتور کاملاً همگن

به منظور تحلیل نتایج به‌دست‌آمده از شبیه‌سازی کوره احتراق بدون شعله و همچنین تفکیک اثرات شیمیایی و فیزیکی ناشی از جایگزینی دی‌اکسیدکربن با نیتروژن بر روی ساختار شعله، محاسبات سینتیکی با استفاده از واکنشگاه اختلاط ایدئال (با توجه به مطالعات پیشین در ارتباط با احتراق بدون شعله، این واکنشگاه تطابق بسیار خوبی با شرایط این رژیم احتراقی دارد) انجام شده است. در این قسمت، به اعتبارسنجی شرایط حلگر و سینتیک شیمیایی مورد استفاده، به عنوان موثرترین پارامترهای تاثیرگذار بر روی نتایج در محاسبات سینتیکی با استفاده از واکنشگاه اختلاط ایدئال، پرداخته شده است.

سینتیک‌های در نظر گرفته شده در این قسمت شامل GRI3.0 با ۵۳ گونه و ۳۲۵ واکنش [۳۲]، C1C3 اصلاح شده با ۱۱۴ گونه و ۱۹۹۹ واکنش [۳۳]، USC2.0 شامل ۱۱۱ گونه و ۷۸۴ واکنش شیمیایی [۳۴] و FCCM-1 با ۳۸ گونه و ۲۹۱ واکنش [۳۵] هستند. این سینتیک‌ها با توجه به بررسی‌های انجام شده در مطالعات پیشین در نظر گرفته شده‌اند. در مطالعه عددی وانگ و همکاران [۳۶]، که با استفاده از واکنشگاه WSR^۱ در شرایط احتراقی متان-هوا انجام شده است، به کارگیری سینتیک GRI3.0 نتایجی با دقت بالا ارائه می‌دهد. همچنین، لیو و همکاران [۳۷] در مطالعه خود نشان داده‌اند که استفاده از سینتیک شیمیایی FCCM-1 در شرایط استفاده از مخلوط $\text{CH}_4/\text{CO}_2/\text{O}_2$ در مقایسه با سینتیک‌های آرامکو، GRI3.0 و USC2.0 منجر به نتایج با دقت بالاتری می‌شود. از طرف دیگر، سینتیک شیمیایی توسعه داده شده توسط رنزی و همکاران [۳۳]، که برای استفاده در احتراق بدون شعله توسط فورست و همکاران [۳۸] اصلاح شده است، بیانگر نتایجی با دقت بسیار بالا در شبیه‌سازی احتراق متان-هوای بدون شعله است.

واکنشگاه اختلاط ایدئال در نظر گرفته شده در بررسی حاضر مربوط به مطالعه انجام شده توسط زابارنیک و زلینا [۳۹] است. همان گونه که در شکل ۶ نشان داده شده است، به منظور حل این واکنشگاه، لازم است تا متغیرهای حجم، زمان ماند و فشار واکنشگاه و همچنین شرایط مخلوط ورودی به آن شامل دما و کسر مخلوط ورودی مشخص باشند. حجم این واکنشگاه معادل

1. Well Stirred Reactor

با ۶۷/۴ سانتی متر مکعب بوده که سوخت (متان خالص) و هوای کاملاً مخلوط شده با دمای ۳۰۰ کلوین وارد آن می‌شوند. واکنش‌های احتراقی تحت فشار یک اتمسفر و در زمان ماند ۰/۰۰۸۶ ثانیه درون واکنشگاه انجام می‌شوند.

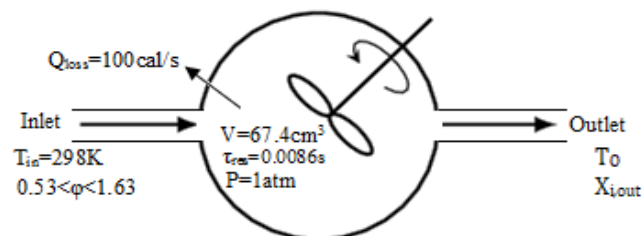


Figure 6- Well stirred reactor
شکل ۶- واکنشگاه اختلاط ایدئال

در شکل ۷، تغییرات دما، کسر مولی اکسیژن و دی‌اکسیدکربن به دست آمده از شبیه‌سازی عددی با استفاده از چهار سینتیک GRI3.0، C1C3، FCCM-1 و USC2 در مقادیر نسبت هم‌ارزی مختلف نشان داده شده است. با توجه به نتایج به دست آمده، سینتیک‌های مورد بررسی در پیش‌بینی دما و گونه CO₂ از دقت خوبی برخوردارند. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، در نواحی سوخت-رقیق و سوخت-غلیظ نتایج چهار سینتیک بسیار به هم نزدیک است و تفاوت اصلی میان آن‌ها در نسبت‌های هم‌ارزی نزدیک به استوکیومتری است. در این ناحیه، سینتیک GRI3.0 نسبت به سایر مکانیسم‌ها از دقت بالاتری برخوردار است. خطای متوسط این سینتیک برای هر سه متغیر مورد بررسی در شبیه‌سازی واکنشگاه اختلاط ایدئال حداقل است. خطای متوسط سینتیک GRI3.0 برای دما و گونه‌های O₂ و CO₂ به ترتیب برابر با ۰/۱، ۱/۶۲ و ۷/۹۲ درصد است.

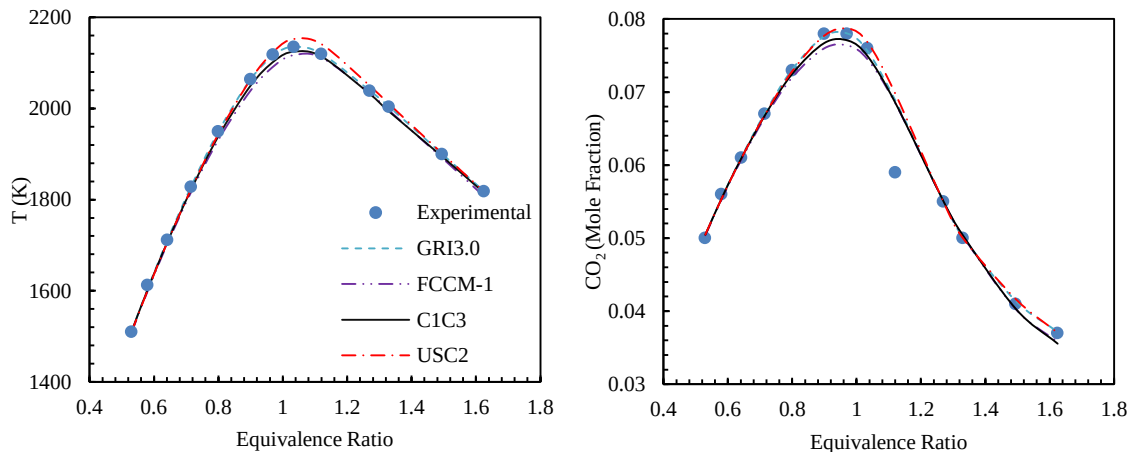


Figure 7- Temperature and carbon dioxide variation as a function of equivalence ratio

شکل ۷- تغییرات دما و دی‌اکسیدکربن بر حسب نسبت هم‌ارزی

مطالعه تجربی ژیه و همکاران [۴۰] برای بررسی عملکرد چهار سینتیک مورد نظر در شرایط تزریق دی‌اکسیدکربن درون اکسیدکننده در نظر گرفته شده است. در این بررسی، از شعله آرام پیش‌آمیخته در محفظه احتراق حجم ثابت به طول ۲۱۰ میلی‌متر و قطر ۱۸۰ میلی‌متر و در شرایط فشار اتمسفر استفاده شده است. محفظه احتراق کاملاً عایق‌بندی شده، به گونه‌ای که هیچ اتلاف حرارتی وجود نداشته باشد. مخلوط سوخت و اکسیدکننده در مقادیر نسبت‌های هم‌ارزی مختلف با دمای ۳۰۰ کلوین به درون محفظه وارد شده‌اند. از مقادیر کسر مولی ۴۰ و ۷۰ درصد CO₂ درون اکسیژن خالص به عنوان اکسیدکننده

استفاده شده است. در شکل ۸، تغییرات سرعت شعله آرام برحسب نسبت هم‌ارزی در شبیه‌سازی عددی شعله پیش‌آمیخته با استفاده از چهار سینتیک بیان‌شده تحت تزریق مقادیر ۴۰ و ۷۰ درصد کسر مولی دی‌اکسیدکربن درون اکسیدکننده نشان داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، در مقادیر نسبت‌های هم‌ارزی کوچک (شرایط سوخت-رقیق)، سینتیک C1C3 در تمامی مقادیر تزریق CO_2 بالاترین دقت را در میان سینتیک‌های در نظر گرفته‌شده دارد. از طرفی، در شرایط نزدیک به استوکیومتری و شرایط سوخت-غنی (نسبت هم‌ارزی بزرگ‌تر از ۰/۹)، با افزایش میزان تزریق CO_2 ، خطای ناشی از سینتیک C1C3 افزایش می‌یابد. با این حال، سینتیک‌های GRI3.0، FCCM-1 و USC2 نیز در محدوده استوکیومتری و شرایط سوخت-غنی خطای بالایی داشته که متوسط آن بیشتر از خطای ناشی از به‌کارگیری سینتیک C1C3 است.

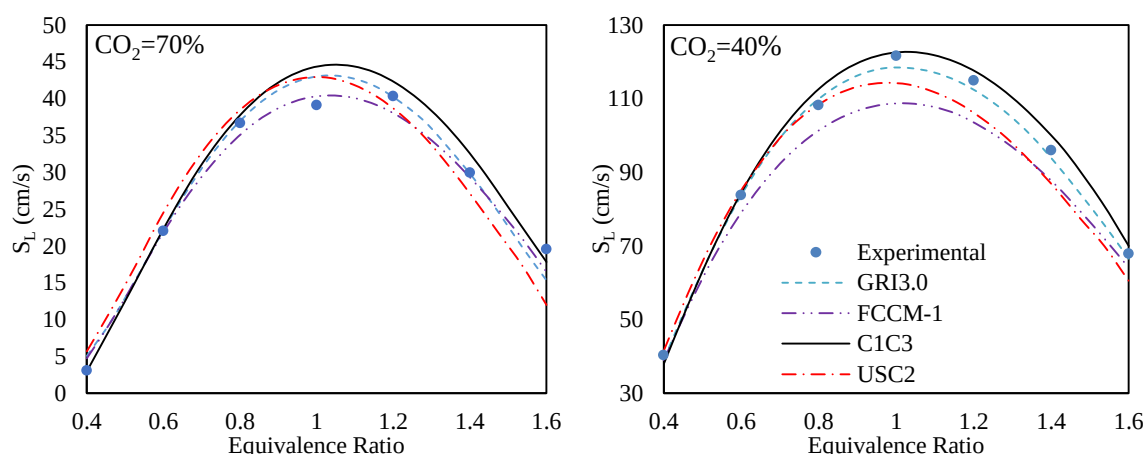


Figure 8- Laminar flame speed variations with equivalence ratio in injection condition of 40 and 70 percent of carbon dioxide
شکل ۸- تغییرات سرعت شعله آرام با نسبت هم‌ارزی در شرایط تزریق ۴۰ و ۷۰ درصدی دی‌اکسیدکربن

با توجه به نتایج به‌دست‌آمده از اعتبارسنجی‌ها و دقت بالای سینتیک C1C3 اصلاح‌شده در شرایط تزریق دی‌اکسیدکربن به‌عنوان قسمت اصلی مطالعه حاضر و همچنین دقت مناسب آن در شبیه‌سازی واکنشگاه اختلاط ایدئال، در ادامه، از سینتیک اصلاح‌شده C1C3، به‌منظور انجام تحلیل حساسیت و محاسبات سینتیک شیمیایی، استفاده شده است.

نتایج و بحث

در این قسمت، به مطالعه تاثیر تزریق دی‌اکسیدکربن درون اکسیدکننده در شرایط احتراقی اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن پرداخته شده است. بدین‌منظور، با توجه به اینکه محصول اصلی احتراق اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن دی‌اکسیدکربن و بخار آب است و از جداسازی دی‌اکسیدکربن از محصولات احتراق در آن استفاده می‌شود، مقادیر مختلفی از نیتروژن در شرایط احتراقی اکسیژن-غنی با دی‌اکسیدکربن جایگزین شده است (در شرایط اکسیژن-غنی از ۲۳ درصد جرمی اکسیژن همراه با ترکیب‌های ۲۵ و ۵۰ درصد جرمی دی‌اکسیدکربن همراه با ۵۲ و ۲۷ درصد کسر جرمی نیتروژن در سمت اکسیدکننده استفاده شده است). مقادیر جایگزینی دی‌اکسیدکربن با نیتروژن به‌صورت تدریجی افزایش یافته تا شرایط احتراقی سوخت-اکسیژن، که در آن مخلوط اکسیژن/دی‌اکسیدکربن به‌عنوان اکسیدکننده استفاده می‌شود، ایجاد شود. در شرایط احتراق سوخت-اکسیژن نیز مقادیر مختلفی از ترکیب اکسیژن/دی‌اکسیدکربن شامل استفاده از ۷۷، ۸۵ و ۹۰ درصد دی‌اکسیدکربن به‌ترتیب با ۲۳، ۱۵ و ۱۰ درصد کسر جرمی اکسیژن مورد بررسی قرار گرفته است. ذکر این نکته لازم است که در شرایط جایگزینی دی‌اکسیدکربن با نیتروژن سایر شرایط احتراقی از جمله نسبت هم‌ارزی ثابت باقی می‌ماند. همچنین، دما و سایر شرایط ورودی سوخت و هوا به‌محافظه احتراق مشابه با شرایط در نظر گرفته‌شده برای اعتبارسنجی‌هاست که پیش از این بیان شد.

در نتایج ارائه شده در مطالعه حاضر، به منظور تفکیک اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دی اکسیدکربن درون اکسیدکننده، از گونه مجاز FCO_2 استفاده شده است. این گونه خواص فیزیکی (شامل جرم مولکولی، چگالی، ظرفیت حرارتی، خواص تشعشعی، گرانروی و ...) کاملاً مشابهی با دی اکسیدکربن داشته، اما در هیچ یک از واکنش‌ها مشارکت ندارد. درواقع، با افزودن این گونه به سینتیک شیمیایی C_1C_3 ، بدون تغییر در مسیر واکنش‌ها، امکان تفکیک اثرات فیزیکی و شیمیایی ناشی از تزریق دی اکسیدکربن به وجود آمده است. مقایسه میان نتایج N_2 با FCO_2 بیانگر تاثیر فیزیکی ناشی از جایگزینی CO_2 با N_2 است، در حالی که مقایسه میان نتایج FCO_2 و CO_2 بیانگر تاثیر شیمیایی تزریق دی اکسیدکربن درون اکسیدکننده است. همچنین، محاسبات سینتیک شیمیایی با استفاده از واکنشگاه اختلاط ایدئال تحت شرایط بیان شده توسط کاوالیر [۴۱] در فشار اتمسفر و مدت زمان ماند^۱ یک ثانیه انجام شده است. واکنش‌های مربوطه تحلیل سینتیکی (تحلیل حساسیت) در جدول ۲ ارائه شده است.

جدول ۲- واکنش‌های مربوطه تحلیل سینتیکی

Table 2- Reactions related to the kinetic analysis

Reaction No.	Reaction	Reaction No.	Reaction
R5	$\text{H}+\text{O}_2 \leftrightarrow \text{O}+\text{OH}$	R6	$\text{H}+\text{OH}+\text{M} \leftrightarrow \text{H}_2\text{O}+\text{M}$
R17	$\text{O}+\text{HO}_2 \leftrightarrow \text{O}_2+\text{OH}$	R18	$\text{OH}+\text{HO}_2 \leftrightarrow \text{O}_2+\text{H}_2\text{O}$
R24	$\text{OH}+\text{CO} \leftrightarrow \text{H}+\text{CO}_2$	R53	$\text{O}_2+\text{CH}_2 \leftrightarrow \text{OH}+\text{HCO}$
R58	$\text{O}_2+\text{CH} \leftrightarrow \text{O}+\text{HCO}$	R68	$\text{O}_2+\text{CH}_3 \leftrightarrow \text{OH}+\text{CH}_2\text{O}$
R69	$\text{O}+\text{CH}_3 \leftrightarrow \text{H}+\text{CH}_2\text{O}$	R79	$\text{HO}_2+\text{CH}_3\text{O}_2 \leftrightarrow \text{O}_2+\text{CH}_3\text{O}_2\text{H}$
R74	$\text{OH}+\text{CH}_3 \leftrightarrow \text{H}_2\text{O}+\text{CH}_2$	R105	$\text{O}_2+\text{CH}_2\text{OH} \leftrightarrow \text{HO}_2+\text{CH}_2\text{O}$
R122	$\text{O}+\text{CH}_2\text{O} \leftrightarrow \text{OH}+\text{HCO}$	R123	$\text{H}+\text{CH}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_2+\text{HCO}$
R124	$\text{OH}+\text{CH}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_2\text{O}+\text{HCO}$	R130	$\text{HCO}+\text{M} \leftrightarrow \text{H}+\text{CO}+\text{M}$
R131	$\text{O}_2+\text{HCO} \leftrightarrow \text{HO}_2+\text{CO}$	R216	$\text{CH}_4+\text{CH} \leftrightarrow \text{H}+\text{C}_2\text{H}_4$
R254	$\text{O}_2+\text{C}_2\text{H} \leftrightarrow \text{CO}+\text{HCO}$	R814	$\text{O}_2+\text{C}_2\text{H} \leftrightarrow \text{O}+\text{HCCO}$
R832	$\text{O}+\text{OH}+\text{M} \leftrightarrow \text{HO}_2+\text{M}$	R986	$\text{O}+\text{CH}_2\text{O} \leftrightarrow 2\text{H}+\text{CO}_2$

تاثیر تزریق مقادیر مختلف دی اکسیدکربن بر دما و تاخیر در اشتعال در کوره احتراق بدون شعله

مقایسه کانتور تغییرات دما تحت شرایط احتراق سوخت-هوا، اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن بدون شعله، برای تزریق مقادیر ۲۵، ۵۰، ۷۷، ۸۵ و ۹۰ درصد کسر جرمی دی اکسیدکربن در سمت اکسیدکننده، در شکل ۹ نشان داده شده است. همان گونه که در این شکل مشاهده می شود، با افزایش تزریق دی اکسیدکربن درون اکسیدکننده، (شرایط احتراقی اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن) از بیشینه دمای احتراقی به صورت قابل توجهی کاسته می شود که این موضوع به علت خواص فیزیکی متفاوت دی اکسیدکربن با نیتروژن و همچنین حضور بسیار فعال تر دی اکسیدکربن در واکنش‌های شیمیایی نسبت به نیتروژن است. خاصیت فیزیکی اصلی دی اکسیدکربن نسبت به نیتروژن، که منجر به کاهش دمای داخل کوره می شود، ظرفیت حرارتی بسیار بالاتر آن نسبت به نیتروژن است. خاصیت فیزیکی موثر دیگر خواص تشعشعی متفاوت دی اکسیدکربن نسبت به نیتروژن است. ضرایب جذب و گسیل دی اکسیدکربن نسبت به نیتروژن بزرگ تر بوده که این موضوع نیز بر روی کاهش دما در نواحی دما بالا منطبق با بررسی انجام شده در مرجع [۳۱] اهمیت بالایی دارد.

موضوع مهم دیگری که در شکل ۹ مشاهده می شود، یکنواخت شدن توزیع دما در شرایط استفاده از دی اکسیدکربن درون اکسیدکننده است. همان طور که مشاهده می شود، استفاده از این گونه در مخلوط اکسیدکننده و افزایش تزریق آن به جای نیتروژن باعث حذف نقاط داغ^۲ در احتراق بدون شعله می شود. از نظر فیزیکی ظرفیت حرارتی بالای دی اکسیدکربن، که منجر به جذب بیشتر حرارت آزاد شده می شود، عامل اصلی در این موضوع بوده و از نظر شیمیایی نیز حضور دی اکسیدکربن در واکنش‌های گرماگیر است که سبب می شود تا بخش اعظمی از حرارت ناشی از احتراق برای انجام آن‌ها جذب شود.

1. Residence Time

2. Hot Spots

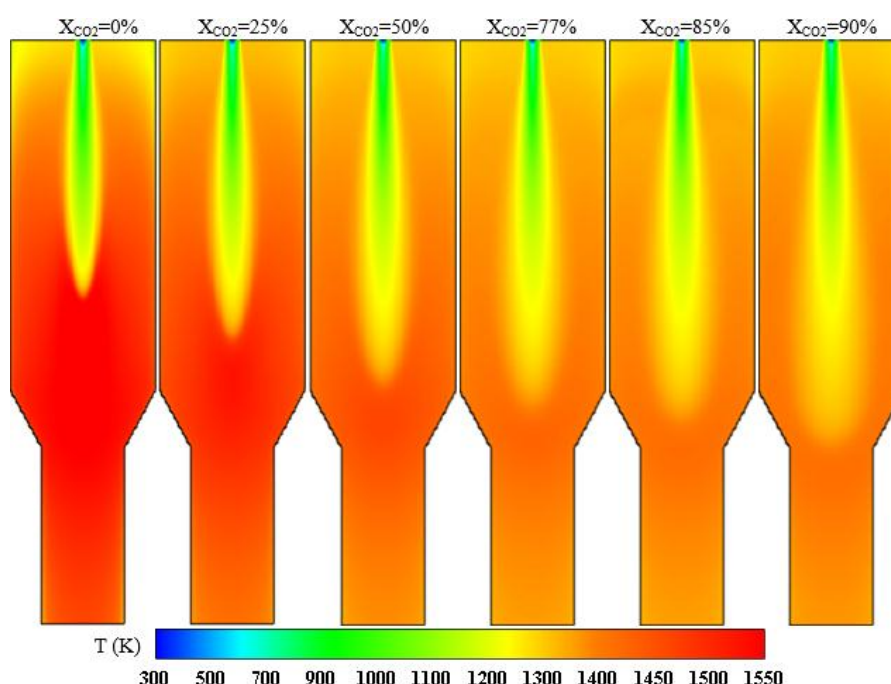


Figure 6- Temperature contour for flameless air-fuel, oxygen enrich and oxy-fuel combustion condition

شکل ۹- کانتور دما برای شرایط احتراقی سوخت- هوا، اکسیژن- غنی و سوخت- اکسیژن بدون شعله

مطابق با شکل ۹، جایگزینی دی اکسیدکربن با نیتروژن منجر به تاخیر در آغاز فرایند احتراق می شود. با توجه به اینکه در احتراق بدون شعله احتراق براساس فرایند خوداشتعالی و در دمای خوداشتعالی مخلوط احتراقی انجام می شود، تزریق دی اکسیدکربن درون اکسیدکننده منجر به تاخیر در آغاز واکنش های شیمیایی می شود. تاخیر در شروع فرایند احتراق از جنبه های متفاوتی در فرایند احتراقی سوخت- اکسیژن و اکسیژن- غنی مورد بررسی قرار گرفته است. استفاده از دی اکسیدکربن در مخلوط احتراقی منجر به افزایش دمای خوداشتعالی می شود. بررسی های تجربی و شبیه سازی های انجام شده با استفاده از واکنشگاه اختلاط ایدئال نشان می دهند که دمای خوداشتعالی مخلوط احتراقی در شرایط استفاده از دی اکسیدکربن حدود پنج تا ده درصد (با توجه به میزان دی اکسیدکربن مورد استفاده) بیشتر از حالتی است که از نیتروژن خالص در مخلوط احتراقی استفاده می شود [۳۶]. دمای خوداشتعالی بالاتر می تواند منجر شود تا واکنش های احتراقی در فاصله محوری بیشتری نسبت به نازل های ورودی سوخت و هوا آغاز شوند.

حضور دی اکسیدکربن در واکنش های شیمیایی در مقایسه با نیتروژن، که فعالیت شیمیایی محدودی در زنجیره واکنش های شیمیایی دارد، عامل دیگری است که می تواند منجر به تاخیر در آغاز فرایند احتراق شود. معیارهای مختلفی در مطالعات تجربی و عددی برای محاسبه تاخیر در فرایند اشتعال ارائه شده است که از جمله آن ها می توان به محاسبه این کمیت بر مبنای افزایش ناگهانی فشار $\left(\frac{dp}{dt}\right)_{\max}$ [۴۲]، وقوع بیشینه گونه های میانی CH_2O ، OH و HO_2 [۴۳-۴۵]، نرخ تغییرات زمانی بیشینه گونه های تحریک شده CH^* و OH^* [۴۶] و همچنین نرخ تغییرات افزایش دمای بیشینه $\left(\frac{dT}{dt}\right)_{\max}$ [۴۷] اشاره کرد. در مطالعه حاضر و در شبیه سازی کوره احتراق بدون شعله، با توجه به مطالعات تجربی و عددی انجام شده در ارتباط با تاخیر در اشتعال در این رژیم احتراقی [۴۴، ۴۸]، از محل وقوع بیشینه مقدار گونه فرمالدهید^۱ برای بررسی تاخیر در زمان اشتعال استفاده شده است. کانتور تغییرات این رادیکال در شکل ۱۰ نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود، استفاده از دی اکسیدکربن منجر می شود تا رادیکال فرمالدهید در فاصله محوری بزرگ تری تشکیل شود که با افزایش هرچه

1. Formaldehyd

بیشتر این تزریق، فاصله محوری تشکیل این رادیکال نیز افزایش می‌یابد. این موضوع بیانگر تأخیر در آغاز اشتعال و در واقع افزایش زمان تأخیر در اشتعال در فرایند احتراق در شرایط اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن بدون شعله است. از طرفی، مطابق با بیشینه مقدار رادیکال فرمالدهید تشکیل شده می‌توان گفت که با افزایش تزریق دی‌اکسیدکربن درون اکسیدکننده از نرخ اشتعال به‌صورت قابل توجهی کاسته می‌شود. همچنین، مطابق با شکل ۱۰ می‌توان نتیجه گرفت که با توجه به تشکیل رادیکال فرمالدهید در ناحیه‌ای گسترده‌تر در شرایط احتراق اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن، نسبت به حالت احتراقی سوخت-هوا، ناحیه خوداشتعالی و انجام واکنش‌ها بر اثر فرایند خوداشتعالی در حالت تزریق دی‌اکسیدکربن وسیع‌تر از حالت استفاده از نیتروژن خالص تحت رژیم احتراقی بدون شعله است.

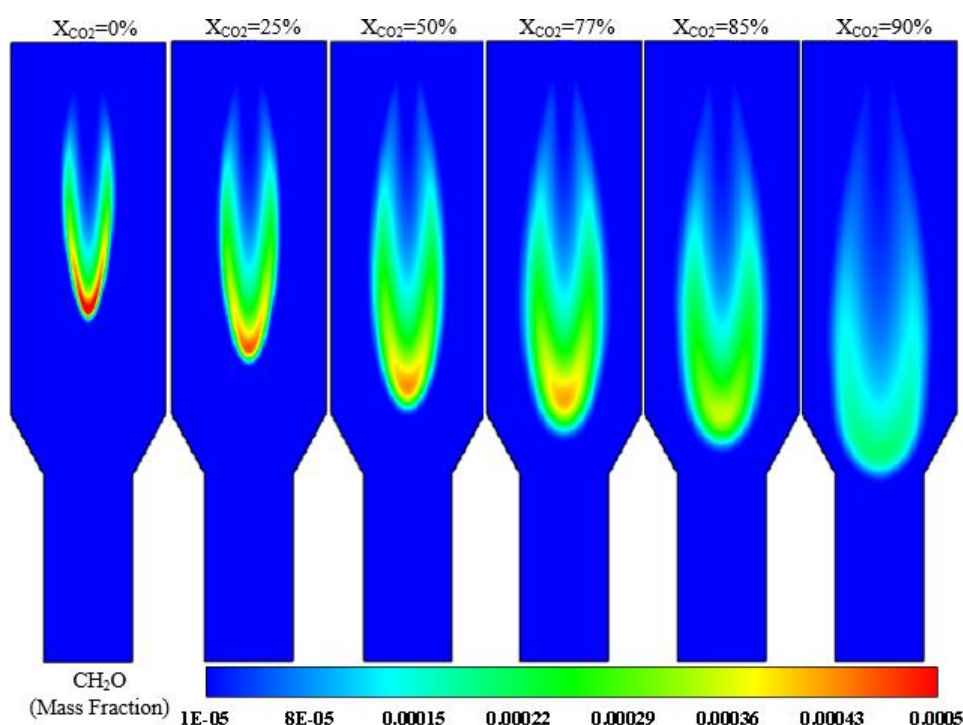


Figure 7- Contour of formaldehyde radical changes under flameless air-fuel, oxygen enrich and oxy-fuel combustion condition

شکل ۱۰- کانتور تغییرات رادیکال فرمالدهید تحت شرایط احتراق سوخت- هوا، اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن بدون شعله

در شکل ۱۱، مقادیر تأخیر در اشتعال برای سه غلظت اکسیژن ۴، ۷ و ۱۰ درصدی تحت شرایط استفاده از نیتروژن، دی‌اکسیدکربن و گونه مجازی FCO_2 با استفاده از محاسبات سینتیکی واکنشگاه اختلاط ایدئال نشان داده شده است. مطابق با نتایج به‌دست‌آمده عامل اصلی در افزایش زمان تأخیر در اشتعال، با جایگزینی CO_2 با N_2 ، تغییر در مسیر واکنش‌های شیمیایی است و تأثیر فیزیکی ناشی از جایگزینی دی‌اکسیدکربن با نیتروژن تأثیر بسیار کمتری نسبت به آن دارد (به‌ویژه در شرایط سطح رقیق‌سازی بالاتر اکسیدکننده). همان‌گونه که از نتایج تحلیل حساسیت به‌دست‌آمده قابل مشاهده است، با وجود افزایش تولید رادیکال فرمالدهید از طریق واکنش R124 ، تأثیر شیمیایی ناشی از جایگزینی N_2 با CO_2 منجر می‌شود تا میزان رادیکال فرمالدهید تشکیل‌شده از طریق واکنش‌های R69 و R122 به‌صورت قابل توجهی کاهش یابد. کاهش تولید فرمالدهید از طریق واکنش R69 ، که به‌صورت عمده مربوط به تأثیر حضور فعال‌تر دی‌اکسیدکربن نسبت به نیتروژن در واکنش‌های شیمیایی است، ناشی از کاهش تولید رادیکال متیل از طریق واکنش $\text{OH} + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{CH}_2$ (R74) است. در این واکنش، بخشی از کاهش رادیکال متیل تولیدشده مربوط به تأثیر فیزیکی ناشی از جایگزینی دی‌اکسیدکربن با نیتروژن بوده و بخش عمده آن مربوط به اثرات شیمیایی ناشی از حضور CO_2 در واکنش‌های شیمیایی است.

تاخیر در فرایند اشتعال از نظر تشکیل رژیم احتراق بدون شعله نیز از اهمیت بالایی برخوردار است. در احتراق معمولی وجود ناپایداری‌ها سبب می‌شود تا از تاخیر در آغاز فرایند اشتعال، به‌منظور حفظ فرایند احتراق و پیشگیری از خاموشی شعله، جلوگیری شود [۴۷]. با وجود این، از آنجا که در احتراق بدون شعله وقوع احتراق بر مبنای خوداشتعالی سوخت و اکسیدکننده است، این چالش وجود نداشته و از این موضوع به‌منظور تسهیل در تشکیل رژیم احتراق بدون شعله استفاده می‌شود. با تاخیر در فرایند اشتعال در کوره بدون شعله مورد بررسی میزان محصولات احتراقی بازچرخش‌یافته بیشتری با سوخت و اکسیدکننده ترکیب شده و ضمن رساندن دمای آن به دمای خوداشتعالی منجر می‌شوند تا مخلوط از نظر غلظت اکسیژن موجود در آن رقیق‌سازی شود (محصولات احتراقی عمدتاً شامل مقادیر بسیار کمی اکسیژن بوده و ترکیب آن با مخلوط نسوخته منجر به رقیق‌سازی سطح اکسیژن موجود در آن می‌شود). این موضوع، که یکی از مهم‌ترین پارامترها در دستیابی به احتراق بدون شعله است، با استفاده از تزریق دی‌اکسیدکربن درون اکسیدکننده به میزان بیشتری قابلیت دسترسی داشته و می‌توان گفت که استفاده از دی‌اکسیدکربن منجر به تسهیل در ایجاد رژیم احتراقی بدون شعله می‌شود.

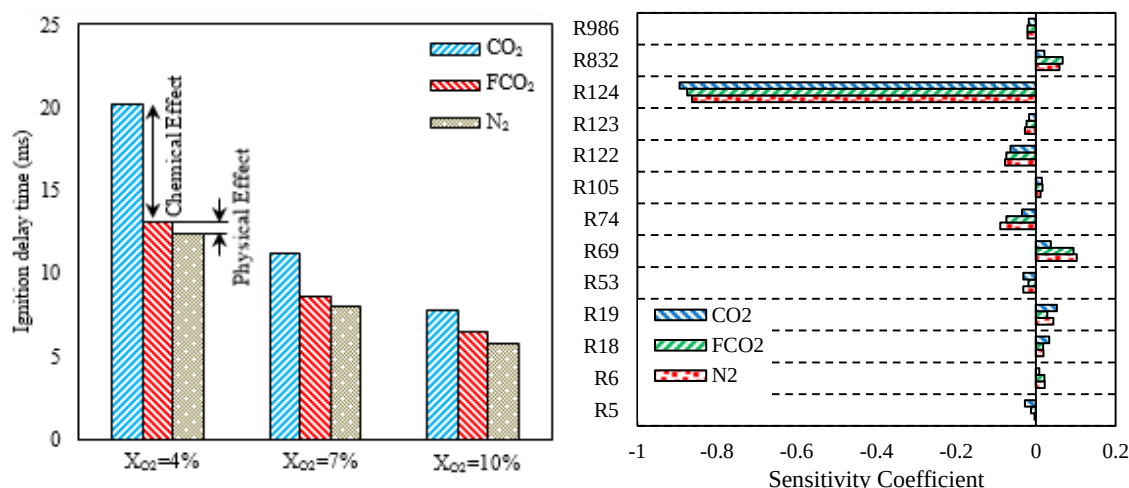


Figure 11- Chemical and physical effects of CO_2 injection on the ignition delay time and sensitivity analysis for calculation of importance reactions on the ignition delay time calculations

شکل ۱۱- اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق CO_2 بر روی تاخیر در زمان اشتعال و تحلیل حساسیت برای یافتن واکنش‌های تاثیرگذار بر روی محاسبات زمان تاخیر در اشتعال

تاثیر تزریق دی‌اکسیدکربن بر رنگ شعله در احتراق سوخت-هوا، اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن بدون شعله

بحث دیگری که در ارتباط با احتراق بدون شعله مورد توجه قرار می‌گیرد در ارتباط با رنگ شعله است. بررسی‌های تجربی نشان‌دهنده آن است که عامل اصلی در تولید رنگ‌های آبی و سبز شعله، که منجر به انتشار نور مرئی قابل رویت برای انسان باشد، به‌ترتیب مربوط به تولید رادیکال‌های CH^* و C_2^* در طول موج‌های ۴۳۱ و ۵۵۰ نانومتر است [۵۰، ۴۹]. در سینتیک شیمیایی GRI2.11 رادیکال‌های CH^* و C_2^* وجود نداشته و لازم است واکنش‌های مربوط به این گونه‌ها به این سینتیک شیمیایی افزوده شود. با توجه به عدم حضور رادیکال C_2 در این مکانیسم و وابستگی واکنش‌های مربوط به رادیکال C_2^* به این گونه، در مطالعه حاضر، تنها تغییرات مربوط به گونه CH^* مورد توجه قرار گرفته است. مطابق با مطالعات پیشین [۵۲، ۵۱، ۴۶] در ارتباط با گونه CH^* از واکنش‌های ارائه‌شده در جدول ۳ برای شبیه‌سازی‌ها استفاده شده و این واکنش‌ها به سینتیک GRI2.11 افزوده شده است.

جدول ۳- مکانیسم واکنشی افزوده شده به مکانیسم GRI2.11 برای مدل سازی گونه CH^*

(ضرایب نرخ واکنشی معادله $k = AT^b \exp(-E_a/RT)$ برحسب واحدهای کالری، مول، سانتی متر و ثانیه بیان شده اند)

Table 3- Chemiluminescence reaction mechanism added to GRI2.11 reaction mechanism in order to model CH^* (rate coefficients are expressed as $k = AT^b \exp(-E_a/RT)$ in units of cal, mol, cm and s)

Reaction No.	Reaction	A	b	$E_a(\text{cal/mol})$
R2460	$C_2H+O \leftrightarrow CH^*+CO$	6.023×10^{12}	0.0	457
R2461	$C_2H+O_2 \leftrightarrow CH^*+CO_2$	6.023×10^{-4}	4.4	-2285.1
R2462	$CH \leftrightarrow CH^*$	1.85×10^6	0.0	0.0
R2463	$CH^*+H_2O \leftrightarrow CH+H_2O$	5.3×10^{13}	0.0	0.0
R2464	$CH^*+CO_2 \leftrightarrow CH+CO_2$	2.41×10^{-1}	4.3	-1694
R2465	$CH^*+CO \leftrightarrow CH+CO$	2.44×10^{12}	0.5	0.0
R2466	$CH^*+H_2 \leftrightarrow CH+H_2$	1.47×10^{14}	0.0	1361
R2467	$CH^*+O_2 \leftrightarrow CH+O_2$	2.48×10^6	2.14	-1720
R2468	$CH^*+N_2 \leftrightarrow CH+N_2$	3.03×10^2	3.4	-381
R2469	$CH^*+CH_4 \leftrightarrow CH+CH_4$	1.73×10^{13}	0.0	167

به منظور بررسی رنگ شعله در مطالعه حاضر، کانتور تغییرات رادیکال CH^* برای تزریق مقادیر ۲۵، ۵۰ و ۷۷ درصدی دی اکسیدکربن در شکل ۱۲ با شرایط احتراق بدون شعله با استفاده از اکسیدکننده هوا (حالت بدون تزریق دی اکسیدکربن) مقایسه شده است. همان گونه که در این شکل مشاهده می شود، با افزایش مقادیر تزریق دی اکسیدکربن میزان رادیکال CH^* تولیدشده در طول موج ۴۳۱ نانومتر به صورت قابل توجهی کاهش می یابد که این موضوع منجر به کاهش انتشار نور آبی رنگ منتشرشده از شعله می شود. این در شرایطی است که با توجه به مشاهدات تجربی انجام شده، در حالت استفاده از هوا به عنوان اکسیدکننده، هیچ گونه جبهه شعله قابل رویت مشاهده نشده است. مطابق نتایج عددی به دست آمده، استفاده از دی اکسیدکربن در جریان اکسیدکننده و افزایش آن منجر می شود تا از عامل انتشار نور آبی رنگ شعله (رادیکال متیلایدین) به صورت قابل توجهی کاسته شود، به گونه ای که در مقدار تزریق ۷۷ درصدی دی اکسیدکربن، کسر جرمی رادیکال متیلایدین به کمتر از ۱۲-۲E رسیده که این مقدار حدود ۴ درصد بیشینه مقدار این رادیکال در حالت احتراق سوخت-هوای بدون شعله است.

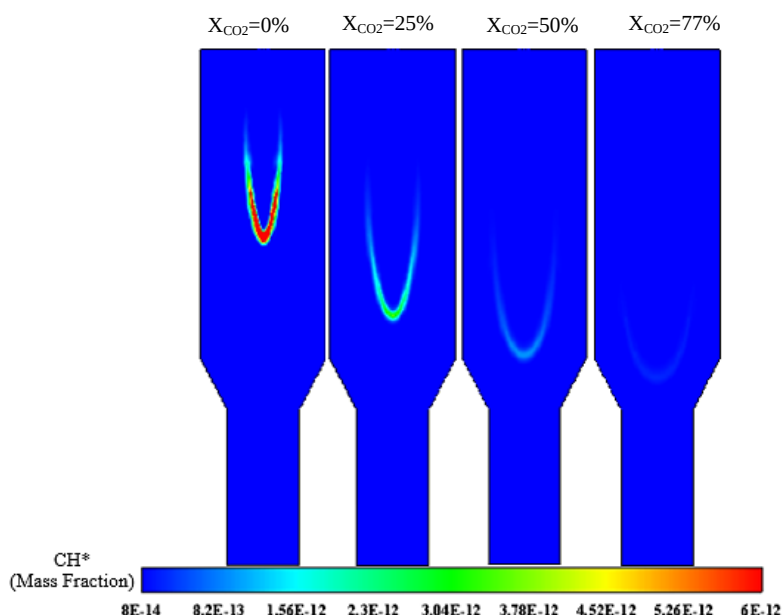
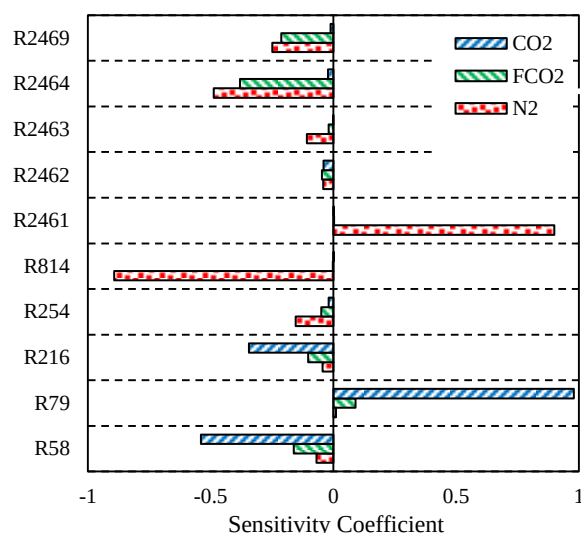


Figure 8- Contour of methylidyne radical changes by injecting 0, 25, 50 and 77% carbon dioxide mass fraction into the oxidizer
 شکل ۱۲- کانتور تغییرات رادیکال متیلایدین با تزریق مقادیر ۰، ۲۵، ۵۰ و ۷۷ درصد کسر جرمی دی اکسیدکربن درون اکسیدکننده

به منظور بررسی تاثیر عوامل فیزیکی و شیمیایی موثر بر تغییرات رادیکال CH^* ، تحلیل حساسیت مربوط به این گونه در شرایط استفاده از گونه‌های نیتروژن، دی‌اکسیدکربن و گونه مجازی FCO_2 در شکل ۱۳ نشان داده شده است. مطابق با این شکل، عامل اصلی در کاهش میزان رادیکال CH^* کاهش واکنش‌های فعال در تولید این رادیکال شامل واکنش‌های $C_2H+O_2 \rightleftharpoons CH^*+CO_2$ ، $CH^*+CO_2 \rightleftharpoons CH+CO_2$ و $CH^*+CH_4 \rightleftharpoons CH+CH_4$ است. تفاوت فیزیکی میان N_2 و CO_2 سبب شده تا نرخ واکنش $C_2H+O_2 \rightleftharpoons CH^*+CO_2$ به صورت قابل توجهی کاهش یافته و در نتیجه میزان CH^* تولید شده به صورت قابل توجهی کاهش یابد، در حالی که اثرات شیمیایی ناشی از جایگزینی CO_2 با N_2 منجر می‌شود تا تولید رادیکال CH^* از طریق واکنش‌های $CH^*+CH_4 \rightleftharpoons CH+CH_4$ و $CH^*+CO_2 \rightleftharpoons CH+CO_2$ تحت شرایط اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن بدون شعله کاهش یابد. مطابق با تحلیل حساسیت انجام شده، میزان رادیکال C_2H تولید شده به عنوان گونه اصلی، که در تولید CH^* نقش بسزایی دارد، از طریق واکنش‌های $O_2+C_2H \rightleftharpoons CO+HCO$ و $O_2+C_2H \rightleftharpoons O+HCCO$ به صورت قابل توجهی کاسته شده و بدین ترتیب سبب می‌شود تا رادیکال CH^* کمتری تولید شود.

Figure 13- Sensitivity analysis for CH^* radicalشکل ۱۳- تحلیل حساسیت رادیکال CH^*

تاثیر تزریق مقادیر مختلف دی‌اکسیدکربن درون اکسیدکننده بر روی ساختار شعله در کوره احتراق بدون شعله

به منظور بررسی تاثیر تزریق دی‌اکسیدکربن درون اکسیدکننده بر ساختار شعله در احتراق اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن بدون شعله، در شکل‌های ۱۴ و ۱۶ به ترتیب کانتور تغییرات کسر جرمی مونوکسیدکربن و رادیکال هیدروکسیل در شرایط تزریق ۰، ۲۵، ۵۰، ۷۷، ۸۵ و ۹۰ درصدی دی‌اکسیدکربن نشان داده شده است. تغییرات کانتور مونوکسیدکربن به گونه‌ای است که با افزایش تزریق دی‌اکسیدکربن در شرایط احتراق اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن از مقدار بیشینه آن به صورت قابل توجهی کاسته می‌شود به گونه‌ای که در شرایط احتراق سوخت-هوای بدون شعله مقدار بیشینه کسر جرمی مونوکسیدکربن بیش از ۰/۱۲ است، در حالی که این مقدار برای شرایط تزریق ۹۰ درصدی دی‌اکسیدکربن به حدود ۰/۰۵ کاهش می‌یابد. کاهش بیشینه مونوکسیدکربن تولید شده از جنبه‌های مختلفی قابل بررسی است. یکی از عوامل اصلی در کاهش کسر جرمی مونوکسیدکربن، همان گونه که پیش از این نیز بیان شد، مربوط به انجام واکنش‌ها در یک ناحیه گسترده‌تر است. برای بررسی تاثیر عوامل فیزیکی و شیمیایی ناشی از جایگزینی CO_2 با N_2 بر روی تغییرات مونوکسیدکربن، تحلیل حساسیت مربوط به این گونه در شکل ۱۵ نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، یکی از واکنش‌های اصلی در تولید مونوکسیدکربن،

واکنش $OH+CO \leftrightarrow H+CO_2$ است. در این واکنش، دی اکسیدکربن با هیدروژن واکنش داده و به رادیکال هیدروکسیل و مونوکسیدکربن تبدیل می شود. مطابق با تحلیل حساسیت انجام شده، تاثیر شیمیایی ناشی از حضور CO_2 در واکنش ها نقش بسیار بیشتری نسبت به عوامل فیزیکی بر واکنش یاد شده داشته و حضور دی اکسیدکربن در واکنش های شیمیایی منجر به کاهش مقدار بیشینه کسر جرمی مونوکسیدکربن تولید شده درون کوره می شود. همچنین، با توجه به نتایج به دست آمده، می توان مشاهده کرد که تاثیر فیزیکی ناشی از تزریق CO_2 درون اکسیدکننده منجر به افزایش میزان CO تولید شده از طریق واکنش $O_2+HCO \leftrightarrow HO_2+CO$ می شود، در حالی که حضور دی اکسیدکربن در واکنش های شیمیایی منجر به کاهش مقدار مونوکسیدکربن تولیدی از طریق این واکنش می شود. این موضوع بیانگر تاثیر بیشتر عوامل فیزیکی نسبت به اثرات شیمیایی بر روی میزان مونوکسیدکربن تولید شده به وسیله این واکنش است.

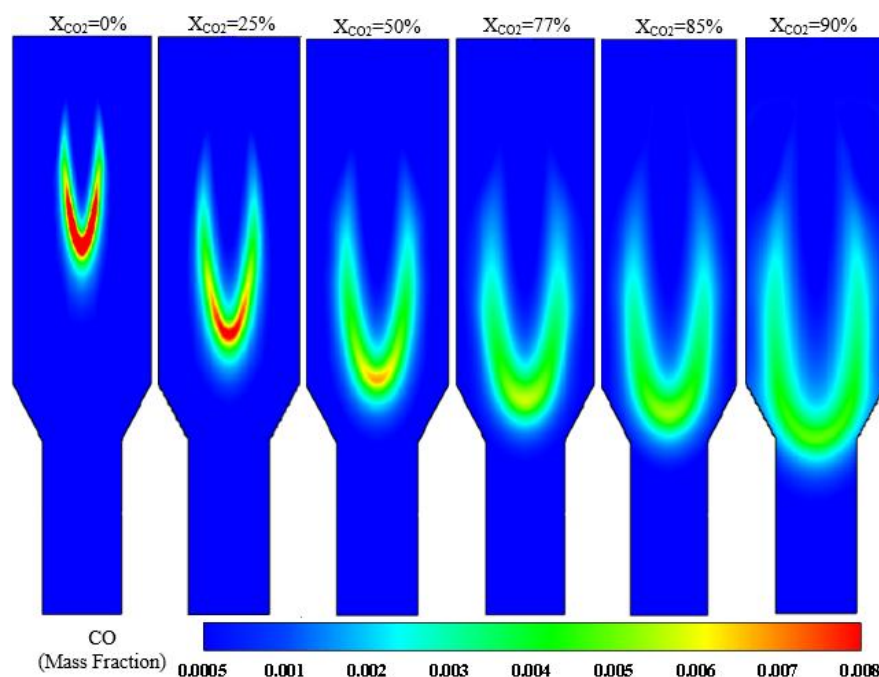


Figure 9- Carbon monoxide mass fraction contour in the flameless air-fuel, oxygen enrich and oxy-fuel combustion condition

شکل ۱۴- کانتور کسر جرمی مونوکسیدکربن در شرایط احتراق سوخت- هوا، اکسیژن- غنی و سوخت- اکسیژن بدون شعله

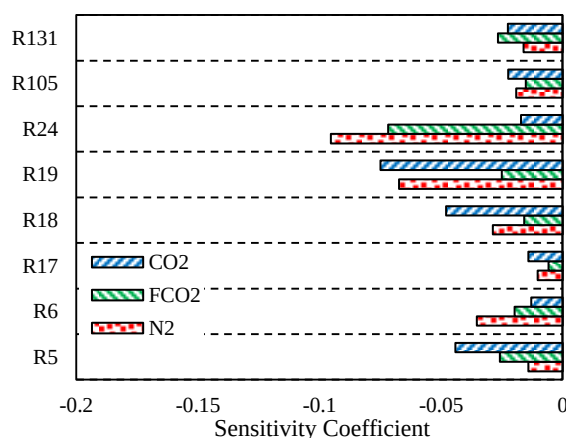


Figure 15- Sensitivity analysis for CO species

شکل ۱۵- تحلیل حساسیت برای گونه مونوکسیدکربن

به منظور بررسی رفتار شعله در فرایندهای احتراقی، تغییرات رادیکال هیدروکسیل مورد توجه قرار می‌گیرد. همان‌طور که در شکل ۱۶ مشاهده می‌شود، ناحیه واکنشی در شرایط احتراق بدون شعله گسترش یافته و اصطلاحاً ناحیه واکنشی توزیع شده در کوره احتراق بدون شعله تشکیل می‌شود. در احتراق معمولی، واکنش‌ها در ناحیه باریکی (جبهه شعله) انجام شده و این موضوع سبب می‌شود تا در آن، مقادیر بیشینه کسر جرمی هیدروکسیل بسیار بیشتر از احتراق بدون شعله باشد. از طرفی، دو نکته اساسی از کانتور تغییرات هیدروکسیل می‌توان مشاهده کرد. موضوع اول مربوط به انتقال واکنش‌های شیمیایی به فاصله محوری و شعاعی بزرگ‌تر با تزریق بیشتر دی‌اکسیدکربن است. موضوع دیگر نیز کاهش قابل توجه میزان رادیکال هیدروکسیل تولیدشده در ناحیه واکنشی با جایگزینی دی‌اکسیدکربن با نیتروژن است که این موضوع بیانگر کاهش نرخ‌های واکنشی و انجام آهسته‌تر فعل‌وانفعالات شیمیایی در شرایط استفاده از دی‌اکسیدکربن در کوره احتراق بدون شعله است. تغییر در رادیکال هیدروکسیل مربوط به هر دو جنبه اثرات فیزیکی و شیمیایی جایگزینی دی‌اکسیدکربن با نیتروژن می‌شود.

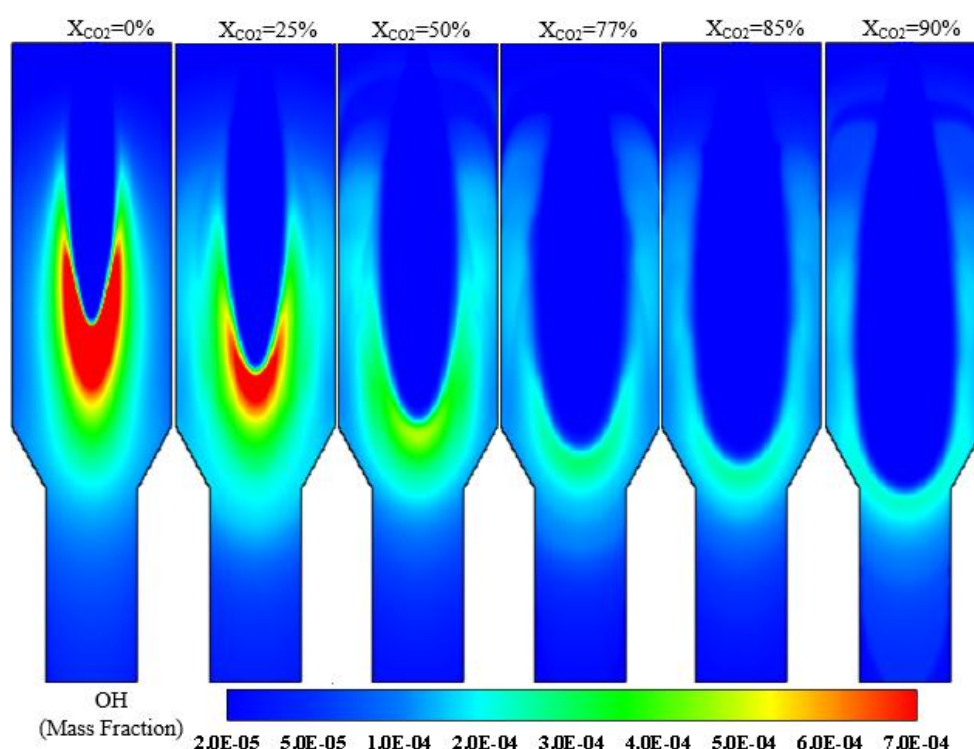


Figure 10- Hydroxyl radical mass fraction contour in the flameless air- fuel, oxygen enrich and oxy-fuel combustion condition
 شکل ۱۶- کانتور کسر جرمی رادیکال هیدروکسیل در شرایط احتراق سوخت- هوا، اکسیژن- غنی و سوخت-اکسیژن بدون شعله

به منظور بررسی هر یک از این اثرات، تحلیل حساسیت مربوط به رادیکال هیدروکسیل در شرایط استفاده از CO_2 ، N_2 و گونه مجازی FCO_2 در شکل ۱۷ نشان داده شده است. مطابق با تحلیل حساسیت انجام‌شده، یکی از عوامل کاهش رادیکال هیدروکسیل کاهش قابل توجه در نرخ واکنش $\text{O} + \text{OH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$ در شرایط تزریق دی‌اکسیدکربن است. در این واکنش، افزایش ضریب حساسیت در شرایط استفاده از FCO_2 نسبت به حالت استفاده از N_2 بیانگر افزایش تولید OH ، به علت تفاوت‌های فیزیکی میان نیتروژن و دی‌اکسیدکربن است. از طرفی حضور CO_2 در واکنش‌های شیمیایی منجر به کاهش قابل توجهی در تولید رادیکال هیدروکسیل از طریق واکنش بیان‌شده می‌شود. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در مجموع، به علت تاثیر بیشتر اثرات شیمیایی، از میزان رادیکال هیدروکسیل توزیع‌شده به صورت قابل توجهی کاسته می‌شود.

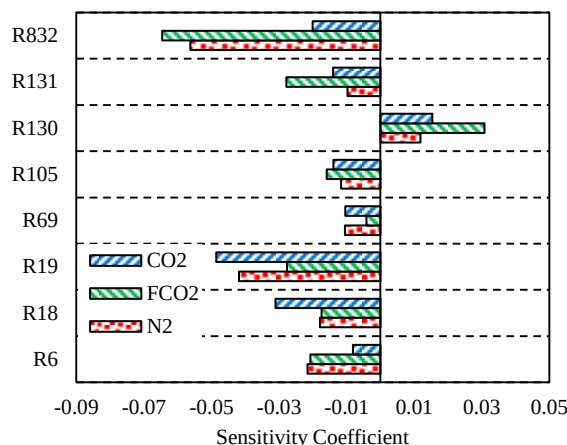


Figure 17- Sensitivity analysis for OH radical
 شکل ۱۷- تحلیل حساسیت برای رادیکال هیدروکسیل

نتیجه‌گیری

در مطالعه حاضر، به بررسی تاثیر جایگزینی دی‌اکسیدکربن با نیتروژن در مخلوط اکسیدکننده بر ساختار شعله در کوره احتراق بدون شعله پرداخته شده است. تغییر در ترکیب اکسیدکننده منجر به انتقال از احتراق سوخت- هوا به اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن می‌شود. بررسی‌ها با استفاده از ترکیبی از دو مدل احتراقی اصلاح‌شده تحت عنوان مدل احتراقی مفهوم اتلاف گردابه بهینه‌سازی شده انجام شده است. مهم‌ترین نتایج حاصل از بررسی‌های عددی انجام‌شده عبارت‌اند از:

الف) با جایگزینی دی‌اکسیدکربن با نیتروژن درون اکسیدکننده، از بیشینه دمای فرایند احتراق کاسته می‌شود. با افزایش این جایگزینی، بیشینه دمایی احتراق به میزان بیشتری کاهش می‌یابد. کاهش در دمای بیشینه شعله از طرفی مربوط به ظرفیت حرارتی بالاتر و انتقال حرارت تشعشعی بیشتر در حالت استفاده از دی‌اکسیدکربن درون اکسیدکننده است. از طرف دیگر نیز حضور فعال‌تر دی‌اکسیدکربن درون واکنش‌های گرماگیر سبب می‌شود تا بخشی از حرارت آزادشده از واکنش‌های شیمیایی صرف انجام این واکنش‌ها شده و از دمای بیشینه شعله کاسته شود. همچنین، در شرایط استفاده از دی‌اکسیدکربن، توزیع دمای درون کوره نسبت به حالت استفاده از نیتروژن به صورت یکنواخت‌تری در می‌آید.

ب) استفاده از دی‌اکسیدکربن به جای نیتروژن درون اکسیدکننده سبب می‌شود تا فرایند اشتعال با تاخیر آغاز شود. با بررسی تغییرات کسر جرمی فرمالدهید و همچنین محاسبات تاخیر در اشتعال با استفاده از واکنشگاه اختلاط ایدئال مشاهده شد که این موضوع به طور عمده مربوط به تغییر در مسیرهای واکنشی و کاهش میزان رادیکال متیل تولیدشده از طریق واکنش $\text{OH} + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{CH}$ است.

ج) در شرایط احتراق اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن از مقادیر رادیکال CH^* در طول موج ۴۳۱ نانومتر به صورت قابل توجهی کاسته می‌شود. کاهش این رادیکال، که عامل اصلی در انتشار رنگ آبی شعله است، سبب می‌شود تا در این دو احتراق شعله نامرئی‌تری تشکیل شود. عامل اصلی در کاهش تشکیل این رادیکال با انتقال به احتراق اکسیژن-غنی و سوخت-اکسیژن تغییر در مسیرهای واکنشی است. واکنش‌های اصلی در تولید این رادیکال واکنش‌های $\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}^* + \text{CO}_2$ ، $\text{CH}^* + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{CH} + \text{CO}_2$ و $\text{CH}^* + \text{CH}_4 \rightleftharpoons \text{CH} + \text{CH}_4$ هستند که در آن‌ها اثرات فیزیکی و شیمیایی ناشی از جایگزینی دی‌اکسیدکربن با نیتروژن سبب می‌شود تا میزان رادیکال CH^* کمتری تولید شود.

د) استفاده از دی‌اکسیدکربن منجر می‌شود تا از بیشینه مقادیر مونوکسیدکربن و رادیکال هیدروکسیل تولیدشده درون کوره احتراق بدون شعله کاسته شود که این موضوع بیانگر کاهش در نرخ واکنش‌های احتراقی نیز است. از طرفی، استفاده از

دی اکسیدکربن منجر می شود تا مونوکسیدکربن و رادیکال هیدروکسیل در ناحیه گسترده تری تشکیل شوند که این موضوع بیانگر گسترده تر شدن ناحیه واکنشی و تشکیل ناحیه واکنشی توزیع شده است. همچنین، تشکیل رادیکال هیدروکسیل در فاصله محوری بزرگ تر در شرایط استفاده از دی اکسیدکربن بیانگر تاخیر در وقوع واکنش های شیمیایی است که این موضوع می تواند منجر به فرصت بیشتر برای بازچرخش محصولات احتراقی به درون مخلوط نسوخته شده و در نتیجه منجر به تسهیل در تشکیل رژیم احتراقی بدون شعله شود.

منابع

1. M. M. Maroto-Valer, *Developments and Innovation in Carbon Dioxide (CO₂) Capture and Storage Technology: Carbon Dioxide (CO₂) Storage and Utilisation*, First Edition, Cambridge, Elsevier, 2010.
2. F. Chitgarha and A. Mardani, "Assessment of steady and unsteady flamelet models for MILD combustion modeling," *International Journal of Hydrogen Energy*, 43, No. 32, 2018, pp. 15551-15563.
3. A. Rebola, M. Costa and P. J. Coelho, "Experimental evaluation of the performance of a flameless combustor," *Applied thermal engineering*, 50, No. 1, 2013, pp. 805-815.
4. P. Li, J. Mi, B. Dally, F. Wang, L. Wang, Z. Liu, S. Chen and C. Zheng, "Progress and recent trend in MILD combustion," *Science China Technological Sciences*, 54, No. 2, 2011, pp. 255-269.
5. P. Li, B. B. Dally, J. Mi and F. J. C. Wang, "MILD oxy-combustion of gaseous fuels in a laboratory-scale furnace," *Flame*, 160, No. 5, 2013, pp. 933-946.
6. M. Sánchez, F. Cadavid and A. Amell, "Experimental evaluation of a 20 kW oxygen enhanced self-regenerative burner operated in flameless combustion mode," *Applied energy*, 111, 2013, pp. 240-246.
7. A. Mardan and A. F. Ghomshi, "Numerical study of oxy-fuel MILD (moderate or intense low-oxygen dilution combustion) combustion for CH₄-H₂ fuel," *Energy*, 99, 2016, pp. 136-151.
8. J. Zhang, J. Mi, P. Li, F. Wang and B. B. J. E. Dally, "Moderate or intense low-oxygen dilution combustion of methane diluted by CO₂ and N₂," *Fuels*, 29, No. 7, 2015, pp. 4576-4585.
9. S. Chen, H. Liu and C. J. E. Zheng, "Methane combustion in MILD oxyfuel regime: Influences of dilution atmosphere in co-flow configuration," *Energy*, 121, 2017, pp. 159-175.
10. C. Dai, Z. Shu, P. Li and J. J. E. Mi, "Combustion characteristics of a methane jet flame in hot oxidant coflow diluted by H₂O versus the case by N₂," *fuels*, 32, No. 1, 2018, pp. 875-888.
11. Y. Tu, H. Liu and W. Yang, "Flame characteristics of CH₄/H₂ on a jet-in-hot-coflow burner diluted by N₂, CO₂, and H₂O," *Energy & Fuels*, 31, No. 3, 2017, pp. 3270-3280.
12. Y. Tu, K. Su, H. Liu, S. Chen, Z. Liu and C. J. E. Zheng, "Physical and chemical effects of CO₂ addition on CH₄/H₂ flames on a Jet in Hot Coflow (JHC) burner," *Fuels*, 30, No. 2, 2016, pp. 1390-1399.
13. K. P. Cheong, P. Li, F. Wang and J. J. E. Mi, "Emissions of NO and CO from counterflow combustion of CH₄ under MILD and oxyfuel conditions," *Energy*, 124, 2017, pp. 652-664.
14. E. Ebrahimi Fordoe and K. Mazaheri, "Chemical and Physical Effects of Carbon Dioxide Injection with Different Preheating Temperature in Flameless Combustion," *Amirkabir Journal of Mechanical Engineering*, 52, No. 2, 2018, pp. 21-30.
15. Y. Tu, M. Xu, D. Zhou, Q. Wang, W. Yang and H. J. A. e. Liu, "CFD and kinetic modelling study of methane MILD combustion in O₂/N₂, O₂/CO₂ and O₂/H₂O atmospheres," *Applied Energy*, 240, 2019, pp. 1003-1013.
16. M. H. Moghadasi, R. Riazi, S. Tabejamaat and A. J. J. o. E. R. T. Mardani, "Effects of Preheating and CO₂ Dilution on Oxy-MILD Combustion of Natural Gas," *Jouran of Energy Resources Technology*, Vol. 141, 2019, pp. 122002-122013.
17. Y. Minamoto and N. Swaminathan, "Scalar gradient behaviour in MILD combustion," *Combustion and flame*, 161, No. 4, 2014, pp. 1063-1075.
18. N. A. K. Doan, N. Swaminathan and Y. Minamoto, "DNS of MILD combustion with mixture fraction variations," *Combustion and Flame*, 189, 2018, pp. 173-189.
19. N. A. K. Doan and N. Swaminathan, "Autoignition and flame propagation in non-premixed MILD combustion," *Combustion and Flame*, 201, 2019, pp. 234-243.
20. A. Parente, M. R. Malik, F. Contino, A. Cuoci and B. B. Dally, "Extension of the Eddy Dissipation Concept for turbulence/chemistry interactions to MILD combustion," *Fuel*, 163, 2016, pp. 98-111.
21. M. T. Lewandowski and I. S. Ertesvåg, "Analysis of the Eddy Dissipation Concept formulation for MILD combustion modelling," *Fuel*, 224, 2018, pp. 687-700.
22. I. R. Gran and B. F. Magnussen, "A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. Part 2. Influence of combustion modeling and finite-rate chemistry," *Combustion Science and Technology*, 119, No. 1-6, 1996, pp. 191-217.
23. B. F. Magnussen, "The eddy dissipation concept: A bridge between science and technology," *ECCOMAS thematic conference on computational combustion*, Libson, Portugal, 2005.
24. B. F. Magnussen and B. H. Hjertager, "On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion," *Symposium (international) on Combustion*, Cambridge, Massachusetts, August 1976.

25. J. Aminian, C. Galletti, S. Shahhosseini and L. Tognotti, "Key modeling issues in prediction of minor species in diluted-preheated combustion conditions," *Applied Thermal Engineering*, 31, No. 16, 2011, pp. 3287-3300.
26. S. R. Shabanian, P. R. Medwell, M. Rahimi, A. Frassoldati and A. Cuoci, "Kinetic and fluid dynamic modeling of ethylene jet flames in diluted and heated oxidant stream combustion conditions," *Applied thermal engineering*, 52, No. 2, 2013, pp. 538-554.
27. A. De, E. Oldenhof, P. Sathiah and D. Roekaerts, "Numerical simulation of delft-jet-in-hot-coflow (djhc) flames using the eddy dissipation concept model for turbulence-chemistry interaction," *Flow, Turbulence and Combustion*, 87, No. 4, 2011, pp. 537-567.
28. A. Mardani, "Optimization of the Eddy Dissipation Concept (EDC) model for turbulence-chemistry interactions under hot diluted combustion of CH₄/H₂," *Fuel*, 191, 2017, pp. 114-129.
29. A. Rebola, P. Coelho and M. Costa, "Assessment of the performance of several turbulence and combustion models in the numerical simulation of a flameless combustor," *Combustion Science and Technology*, 185, No. 4, 2013, pp. 600-626.
30. S. H. Kim, K. Y. Huh and B. Dally, "Conditional moment closure modeling of turbulent nonpremixed combustion in diluted hot coflow," *Proceedings of the Combustion Institute*, 30, No. 1, 2005 pp. 751-757.
31. E. Ebrahimi Fordoei and K. Mazaheri, "Numerical study of chemical kinetics and radiation heat transfer characteristics on the temperature distribution in the oxy-fuel combustion," *Heat and Mass Transfer*, 55, No. 7, 2019, pp. 2025-2036.
32. G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song and W. C. J. G. R. I. Gardiner Jr, GRI 3.0 Mechanism, 1999, Gas Research Institute http://www.me.berkeley.edu/gri_mech, Accessed 14 February 2020.
33. E. Ranzi, C. Cavallotti, A. Cuoci, A. Frassoldati, M. Pelucchi and T. Faravelli, "New reaction classes in the kinetic modeling of low temperature oxidation of n-alkanes," *Combustion and flame*, 162, No. 5, 2015, pp. 1679-1691.
34. H. Wang, X. You, A. Joshi, S. Davis, A. Laskin and F. Egolfopoulos, USC Mech Version II, May 2007, High-Temperature Combustion Reaction Model of H₂/CO/C1-C4 Compounds, http://ignis.usc.edu/USC_Mech_II.htm, Accessed 14 February 2020
35. G. Smith, Y. Tao and H. J. e. Wang, accessed July, Foundational Fuel Chemistry Model Version 1.0 (FFCM-1), 2016, <http://nanoenergy.stanford.edu/ffcm1>, Accessed 16 February 2020.
36. F. Wang, P. Li, Z. Mei, J. Zhang and J. Mi, "Combustion of CH₄/O₂/N₂ in a well stirred reactor," *Energy*, 72, 2014, pp. 242-253.
37. Y. Liu, C. Zou, J. Cheng, H. Jia and C. Zheng, "Experimental and numerical study of the effect of CO₂ on the ignition delay times of methane under different pressures and temperatures," *Energy & fuels*, 32, No. 10, 2018, pp. 10999-11009.
38. M. Fürst, P. Sabia, M. Lubrano Lavadera, G. Aversano, M. De Joannon, A. Frassoldati and A. Parente, "Optimization of chemical kinetics for methane and biomass pyrolysis products in moderate or intense low-Oxygen dilution combustion," *Energy & fuels*, 32, No. 10, 2018, pp. 10194-10201.
39. S. Zabarnick and J. Zelina, "Chemical kinetics of NO_x production in a well stirred reactor," *Intersociety Energy Conversion Engineering Conference*, Monterey, California, United States, August 1994.
40. Y. Xie, J. Wang, M. Zhang, J. Gong, W. Jin and Z. J. E. Huang, "Experimental and numerical study on laminar flame characteristics of methane oxy-fuel mixtures highly diluted with CO₂," *Fuels*, 27, No. 10, 2013, pp. 6231-6237.
41. A. Cavaliere and M. de Joannon, "Progress in Energy and Combustion science," *Mild combustion*, 30, No. 4, 2004, pp. 329-366.
42. N. Donohoe, A. Heufer, W. K. Metcalfe, H. J. Curran, M. L. Davis, O. Mathieu, D. Plichta, A. Morones, E. L. Petersen and F. Güthe, "Ignition delay times, laminar flame speeds, and mechanism validation for natural gas/hydrogen blends at elevated pressures," *Combustion and Flame*, 161, No. 6, 2014, pp. 1432-1443.
43. M. De Joannon, A. Cavaliere, R. Donnarumma and R. Ragucci, "Dependence of autoignition delay on oxygen concentration in mild combustion of high molecular weight paraffin," *Proceedings of the Combustion Institute*, 29, No. 1, 2002, pp. 1139-1146.
44. P. R. Medwell, P. A. Kalt and B. B. Dally, "Simultaneous imaging of OH, formaldehyde, and temperature of turbulent nonpremixed jet flames in a heated and diluted coflow," *Combustion and Flame*, 148, No. 1-2, 2007, pp. 48-61.
45. A. Parente, C. Galletti and L. Tognotti, "Effect of the combustion model and kinetic mechanism on the MILD combustion in an industrial burner fed with hydrogen enriched fuels," *International journal of hydrogen energy*, 33, No. 24, 2008, pp. 7553-7564.
46. M. Baigmohammadi, V. Patel, S. Martinez, S. Panigrahy, A. Ramalingam, U. Burke, K. P. Somers, K. A. Heufer, A. Pekalski and H. J. Curran, "A Comprehensive Experimental and Simulation Study of Ignition Delay Time Characteristics of Single Fuel C1-C2 Hydrocarbons over a Wide Range of Temperatures, Pressures, Equivalence Ratios, and Dilutions," *Energy & Fuels*, 34, No. 3, 2020, pp. 3755-3771.
47. C. Zheng and Z. Liu, *Oxy-fuel Combustion: Fundamentals, Theory and Practice*, First Edition, Massachusetts, Academic Press, 2017.
48. M. J. Evans, P. R. Medwell, Z. F. Tian, A. Frassoldati, A. Cuoci and A. Stagni, "Ignition characteristics in spatially zero-, one- and two-dimensional laminar ethylene flames," *AIAA Journal*, Vol. 54, 2016, pp. 3255-3264.
49. K. Ashwani and T. H. Gupta, "High temperature air combustion: flame characteristics, challenges and opportunities," *Proceeding of Beijing Symposium on High Temperature Air Combustion*, Beijing University, Beijing, China, October 1999, pp. 10-28.

50. A. K. Gupta, "Thermal characteristics of gaseous fuel flames using high temperature air," *J. Eng. Gas Turbines Power*, 126, No. 1, 2004, pp. 9-19.
51. V. Nori and J. Seitzman, Evaluation of chemiluminescence as a combustion diagnostic under varying operating conditions, *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, Nevada, United States, January 2008.
52. V. N. Nori and J. M. Seitzman, "CH* chemiluminescence modeling for combustion diagnostics," *Proceedings of the Combustion Institute*, 32, No. 1, 2009, pp. 895-903.

English Abstract

Numerical study of the effect of carbon dioxide injection on flame structure in flameless combustion regime

Esmaeil Ebrahimi Fordoei¹ and Kiumars Mazaheri^{2*}

1- Department of Mechanical Engineering, TarbiatModares University, Tehran, Iran, E.ebrahimifordoei@modares.ac.ir

2- Department of Mechanical Engineering, TarbiatModares University, Tehran, Iran, Kiumars@modares.ac.ir

*Corresponding author

(Received: 2020.03.09, Received in revised form: 2020.04.29, Accepted: 2020.05.22)

The present study investigates the effect of carbon dioxide injection on the flame structure using numerical simulation of flameless furnace. Using the different amounts of CO₂ injection into the oxidizer leads to the formation of three air-fuel, oxygen-enriched and oxy-fuel combustion modes. Numerical simulations are performed using OpenFoam software. Standard k- ϵ turbulence and discrete ordinate models are used for the calculation of momentum and energy equation source terms, respectively. Four combustion models based on the eddy dissipation concept model are also used to validation of turbulence-chemistry interaction model. Investigations are included the temperature distribution, ignition delay, flame color, and OH radical in order to the study of flame structure. The results show that by switching from air-fuel flameless combustion to oxygen-enriched and oxy-fuel flameless combustions coupled with the replacement of part or all of the mass fraction of N₂ with CO₂, the maximum flame temperature is reduced due to the higher CO₂ heat capacity and active presence of CO₂ in the chemical reactions. Moreover, the presence of CO₂ in oxygen-enriched and oxy-fuel combustion results in a delayed in ignition process and significantly reduces the concentration of excited methylidyne radical (CH*), which is the main factor of visible light emission.

Keywords: Flameless Combustion, Carbon Dioxide Injection, Oxygen Enrich Combustion, Oxy-Fuel Combustion, Flame Structure