

مطالعه ساختار شعله گاز سنتز تحت شرایط سوخت-هوا، اکسیژن غنی و سوخت- اکسیژن بدون شعله: بررسی اثر ترکیب سوخت، دمای پیش‌گرمایش و کسر مولی اکسیژن اکسنده

احمد شاکر^۱، سید عبدالمهدی هاشمی^{۲*}، اسماعیل ابراهیمی فردویی^۳

۱- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ahmadshaker68@gmail.com

۲- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه کاشان، کاشان، hashemi@kashanu.ac.ir

۳- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه تفرش، تفرش، ebrahimifordoei@tafreshu.ac.ir

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۱۲/۰۵، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۴۰۲/۰۴/۱۴، پذیرش: ۱۴۰۲/۰۴/۱۹)

چکیده: در مطالعه حاضر تأثیر دمای پیش‌گرمایش اکسنده و کسر جرمی اکسیژن موجود در آن به‌عنوان پارامترهای اصلی و موثر بر احتراق بدون شعله گاز سنتز تحت شرایط سوخت-هوا، اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن بررسی شده است. شبیه‌سازی‌ها به‌وسیله حلگر شعله نفوذی جریان متقابل با استفاده از سینتیک شیمیایی GRI3.0 انجام شده است. به‌منظور تفکیک اثرات فیزیکی و شیمیایی جایگزینی CO_2 با N_2 ، از گونه مجازی VCO_2 با خواص فیزیکی کاملاً مشابه با CO_2 بدون حضور در زنجیره واکنش‌ها استفاده شده است. مطابق با نتایج به‌دست آمده اثرات فیزیکی در دماهای اکسنده پایین‌تر و اثرات شیمیایی در دماهای اکسنده بالاتر غالب هستند. بررسی تأخیر تأخیر در اشتعال نشان‌دهنده آن است که تحت شرایط سوخت-اکسیژن، افزایش نسبت هیدروژن به مونوکسید کربن سوخت از ۰/۲۵ به یک و از یک به چهار به ترتیب منجر به کاهش فاصله محوری اشتعال از ۰/۴ به ۰/۳۹ و از ۰/۳۹ به ۰/۳۷۵ می‌شود. مقایسه میان کسر مولی اکسیژن اکسنده و دمای پیش‌گرمایش ورودی نشان می‌دهد که دمای پیش‌گرمایش تأثیر بیشتری بر پارامترهای ساختار جریان واکنشی نظیر تأخیر در اشتعال و حرارت آزاد شده دارد.

کلیدواژگان: گاز سنتز، احتراق بدون شعله، مطالعه عددی، اثرات شیمیایی و فیزیکی، سینتیک شیمیایی

مقدمه

مسائل و مشکلات استفاده از سوخت‌های فسیلی، مانند افزایش آلودگی هوا، تجدیدنپذیری منابع و بسیاری موارد دیگر باعث توجه بسیاری از محققان به سمت منابع جدید انرژی شده است [۱]. راهکارهای مختلفی برای غلبه بر این مشکلات پیشنهاد شده است. احتراق گاز سنتز (سنتز گاز) تولید شده از زیست توده، زغال سنگ، گاز طبیعی و زباله‌های آلی به‌عنوان سوخت جایگزین و پایدار برای تولید انرژی در فرآیند احتراق کوره‌ها و نیروگاه‌ها یکی از راهکارهای عملی و مورد توجه برای فائق آمدن بر این چالش‌ها است [۲-۴]. گاز سنتزها اجزای مختلفی در ترکیب خود دارند (به‌عنوان نمونه متان یا نیتروژن به‌عنوان رقیق کننده) اما عمدتاً شامل هیدروژن و مونوکسید کربن هستند. به‌دلیل کربن کمتر موجود در ترکیب گاز سنتزها نسبت به سوخت‌های فسیلی مانند زغال سنگ و متان، امکان کاهش بیشتر انتشار دی‌اکسید کربن به‌عنوان گاز گلخانه‌ای اصلی منتشر شده در جو وجود دارد [۵]. از طرفی گاز سنتز می‌تواند به‌عنوان منبع سوختی پایدار در فرآیندهای احتراقی مورد استفاده قرار گیرد.

مطالعه‌های گسترده‌ای روی احتراق سوخت‌های زیستی (Biofuel) به‌عنوان یک منبع سوخت پایدار به‌منظور جایگزینی با سوخت‌های فسیلی از قبیل گاز طبیعی و زغال سنگ انجام شده است. در کار تجربی چینیکی و همکاران [۶] روی ترکیب مختلف گاز سنتز تمرکز شده و تأثیر آن بر روی نرخ انتقال حرارت تابشی، نرخ واکنش‌ها و همچنین ویژگی‌های ناحیه واکنش بررسی و گزارش شده است. نتایج این مطالعه بیانگر آن است که رژیم احتراق MILD می‌تواند در طیف گسترده‌ای از ترکیب‌های گاز سنتز و پارامترهای عملکردی تشکیل شود. علاوه بر این در این مطالعه نشان داده شده است که افزایش نسبت H_2/CO در ترکیب گاز سنتز سبب افزایش محدوده پایداری احتراق MILD می‌شود. در مطالعه‌ای دیگر توسط گیانماریا و همکاران [۷] با استفاده از روابط نیمه تجربی و شبیه‌سازی سینتیکی به بررسی ترکیب‌های بیو-سینگر در دمای پایین و فشار اتمسفر پرداخت شده و اثر آن روی نرخ تولید انرژی و نرخ واکنش‌ها مطالعه شده است. مقایسه نتایج بدست آمده از این روابط و مطالعه شیمیایی تطابق قابل قبولی ارائه می‌کنند. نتایج ترکیب گاز طبیعی (NG) و گاز سنتز توسط هرناندز و همکاران [۸] نشان می‌دهد که دمای متوسط حدود ۶ درصد نسبت به سوخت گاز طبیعی کاهش یافته، نرخ واکنش‌های شیمیایی افزایش یافته و ناحیه واکنشی نیز به‌دلیل تولید بیشتر رادیکال‌های هیدروژن و هیدروکسیل به بالادست جریان منتقل شده است. همچنین نرخ تولید رادیکال فرمالدهید افزایش یافته و مطابق با تغییرات CH_2O ، تأخیر در اشتعال نیز کاهش می‌یابد. بررسی‌های انجام شده توسط ابراهیمی و همکاران [۹] نشان می‌دهد افزایش هیدروژن موجود در ترکیب گاز سنتز سبب توزیع یکنواخت دما در شرایط دمای بالای اکسند شده و متوسط دما نیز با افزایش H_2 بیشتر می‌شود. افزایش بیشتر کسر جرمی هیدروژن به متان سبب تبدیل رژیم احتراقی MILD به رژیم احتراق دما بالا شده است. مطابق با نتایج این مطالعه، مقدار هیدروژن بحرانی در ترکیب گاز سنتزها متناسب با شرایط ورودی وجود دارد که در مقادیر بیشتر از آن، رژیم احتراقی از بدون شعله به معمولی تغییر می‌یابد.

در دو دهه گذشته، احتراق MILD به‌عنوان یک روش موثر برای کاهش انتشار آلاینده‌ها به ویژه NO و افزایش راندمان سیستم‌های احتراقی معرفی شده است [۱۰-۱۳]. رژیم MILD مبتنی بر رقیق‌سازی شدید اکسند از نظر میزان اکسیژن موجود در آن و پیش‌گرمایش مخلوط احتراقی است که این کار با بازچرخش شدید محصولات احتراق حاصل می‌شود. در واقع در این رژیم، چرخش بالای محصولات احتراق منجر به تشکیل ناحیه واکنشی با نرخ واکنش پایین‌تر می‌شود. ابراهیمی و مظاهری [۱۴] تأثیر استفاده از دی‌اکسید کربن به‌عنوان رقیق‌ساز بر ساختار شعله متان بدون شعله را مورد بررسی قرار دادند. کاهش رادیکال CH^* تولید شده و در نتیجه آن نور مرئی ساطع شده از شعله با جایگزینی دی‌اکسید کربن با نیتروژن از نتایج تحقیق ایشان است که بیانگر تسهیل در تشکیل احتراق بدون شعله با استفاده از دی‌اکسید کربن در احتراق غیرپیش‌آمیخته متان است. از نتایج دیگر تحقیق ایشان می‌توان به افزایش تأخیر در اشتعال در اثر تزریق دی‌اکسید کربن درون اکسند اشاره کرد. مقدسی و همکاران [۱۵] در مطالعه‌ای به بررسی اثر دمای پیش‌گرمایش و سطح رقیق‌سازی اکسند بر میدان احتراقی و ترکیب محصولات در احتراق متان-اکسیژن بدون شعله پرداختند. افزایش سطح رقیق‌سازی با CO_2 همراه با کاهش دمای بیشینه، میانگین و خروجی از محفظه احتراق بوده که مقدار کاهش دما برای بیشینه دما محسوس‌تر است. شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهد که افزایش سطح دی‌اکسید کربن موجود در مخلوط احتراقی سبب افزایش چشمگیر مونوکسید کربن تولید شده می‌شود که دلیل آن رقابت شیمیایی میان گونه‌های متان و دی‌اکسید کربن در جذب رادیکال هیدروژن عنوان شده است. عطارزاده و همکاران [۱۶] در مطالعه خود به بررسی تأثیر شرایط حرارتی حاکم بر دیواره و ساختار اکسند بر ساختار شعله و رژیم احتراقی در کوره احتراقی غیرپیش‌آمیخته پرداختند. ایشان در بررسی خود نشان دادند که افزایش تلفات حرارتی دیواره منجر به تسهیل تشکیل رژیم بدون شعله می‌شود. در این مطالعه نشان داده شده است که برای کمینه کردن اتلاف حرارتی از دیواره به منظور تشکیل احتراق بدون شعله لازم است تا ساختار اکسند از اکسیژن/نیتروژن به اکسیژن/دی‌اکسید کربن تغییر پیدا کند.

تشکیل احتراق گاز سنتز MILD با توجه به شرایط حاکم بر احتراق هر یک از آنها می‌تواند امکان برطرف کردن چالش‌های مربوط به احتراق گاز سنتز و احتراق بدون شعله با سوخت‌های فسیلی را فراهم آورد. از این رو بررسی‌های گوناگونی طی دهه اخیر بر روی احتراق گاز سنتز بدون شعله و پارامترهای موثر بر آن انجام شده است. هوانگ و همکاران [۱۷] تحقیق‌های خود را بر روی چهار سوخت گاز سنتز متداول با استفاده از مدل‌سازی احتراقی کوره با جریان سوخت و هوا به صورت جت موازی و جریان رو به جلو (هم جهت) که وارد محفظه احتراق می‌شود، انجام دادند. نتایج تحقیق‌های آنها نشان می‌دهد، در سوخت گاز سنتز با رقیق‌سازی بیشتر به وسیله گازهای بی‌اثر (CO_2 و N_2) و غلظت کمتر اجزای فعال (CO و H_2)، دمای احتراق بالاتری در شرایط MILD بدست می‌آید. همچنین گزارش شده است که سوخت گاز سنتز با کسر مولی بالاتر N_2 و CO_2 ، دستیابی به احتراق MILD با انتشار کمتر آلاینده NO_x را تسهیل می‌کند. در مطالعه‌ای دیگر، هوانگ و همکاران [۱۸] احتراق MILD سوخت گاز سنتز بدست آمده از زغال سنگ را نیز با استفاده از مدل آزمایشگاهی قبل بررسی کردند. نتایج بررسی‌های انجام شده نشان می‌دهد، پیش گرم کردن هوا منجر به افزایش آلاینده NO_x و کاهش انتشار آلاینده CO شده است. ایشان نشان دادند که افزایش نسبت هم ارزی نیز نتیجه مشابهی در پی خواهد داشت. این گروه در تحقیقی دیگر [۱۹] چهار شرایط متفاوت تزریق سوخت و هوا شامل تزریق گاز سنتز و هوا به صورت هم جهت و تزریق گاز سنتز و هوا در جهت مخالف یکدیگر را تحت شرایط MILD مطالعه کردند. نتایج بررسی‌ها نشان می‌دهد، تزریق سوخت و هوا به صورت هم جهت، تطابق مناسب‌تری با شرایط احتراق MILD داشته و تشکیل این رژیم احتراقی را تسهیل می‌سازد. این موضوع به دلیل چرخش شدیدتر گازهای حاصل از احتراق درون محفظه و همچنین اختلاط سوخت و هوا با تأخیر بیشتر نسبت به شرایط تزریق سوخت و هوا در جهت خلاف یکدیگر گزارش شده است. نتایج ارائه شده توسط مردانی و کریمی [۲۰] بر روی احتراق گاز سنتز تحت رژیم MILD نشان می‌دهد که با افزایش غلظت هیدروژن در مخلوط سوخت، حجم ناحیه دما بالا در ناحیه احتراقی افزایش می‌یابد. همچنین برای دستیابی به شرایط MILD غنی‌سازی سوخت با هیدروژن بهتر از غنی‌سازی سوخت با متان است؛ به عبارت دیگر، گاز سنتز حساسیت بیشتری نسبت به غنی‌سازی با هیدروژن نسبت به غنی‌سازی با متان نشان می‌دهد. مطالعه هوانگ و همکاران [۲۱] بیانگر آن است که با افزایش فشار، کسر مولی رادیکال هیدروکسیل کاهش یافته و این موضوع سبب تأخیر در فرآیند اکسیداسیون می‌شود. بر این اساس، پارامتر فشار بر شرایط احتراق MILD نیز می‌تواند اثرگذار باشد. البته باید اشاره کرد که در این تحقیق نشان داده شده است که برای عدد بازچرخش معین گازهای حاصل از احتراق درون مخلوط سوخت و هوا، فشار تأثیر ناچیزی بر دمای خود اشتعالی تحت رژیم MILD دارد. مطابق با بررسی انجام شده توسط هوانگ و همکاران [۲۲] روی محفظه احتراق با تزریق دو مرحله‌ای سوخت و هوا، مشخص شده که افزایش سرعت پاشش سوخت ثانویه، ورود زود هنگام اکسنده به سوخت ثانویه را تسهیل نموده و این موضوع سبب افزایش ارتفاع ناحیه واکنشی و کاهش دمای شعله شده است. به تبع تغییرات ایجاد شده در ساختار شعله، میزان آلاینده NO تولیدی کاهش و افت فشار و تولید CO افزایش یافته است. موسوی و همکاران [۲۳] به بررسی ساختار ناحیه واکنش ترکیبات گاز سنتز، متان و آمونیاک در شرایط احتراق بدون شعله برای تعیین اثرات تغییرات آمونیاک و کسر مولی گاز سنتز بر ثبات سیستم واکنش و انتشار آلاینده ناکس پرداخته‌اند. بررسی‌های این گروه نشان می‌دهد کاهش در کسر مولی آمونیاک، منجر به افزایش غلظت رادیکال هیدروکسیل می‌شود که این موضوع حاکی از کاهش تأخیر در اشتعال است. همچنین افزایش محتوای گاز سنتز در ترکیب سوخت همراه با کاهش درمتان سبب افزایش دمای بیشینه احتراق در نزدیکی منطقه ورودی شده است. در این شرایط با کاهش کسر جرمی گونه فرمالدهید، پایداری شرایط احتراق بدون شعله تقویت شده است. در تحقیق دیگری لوپز و همکاران [۲۴] اثرات فاز تزریق سوخت بر آزادسازی گرما و تشکیل دوده در شعله‌های جریان متقابل را بررسی کرده‌اند. ترکیب استفاده شده توسط ایشان شامل اتانول، نیتروژن و هوا و همچنین n-بوتانول، نیتروژن و هوا است. بررسی نتایج ارائه شده، شباهت‌های کیفی را برای هر دو سوخت نشان می‌دهد، ضمن اینکه تفاوت‌های کمی نیز مشاهده شده است. به صورت کلی شعله‌های اتانول گرمای بیشتر و دوده کمتری نسبت به شعله‌های n-بوتانول آزاد می‌کنند. این مطلب نشان می‌دهد که فاز تزریق سوخت نقش

مهمی در بهینه‌سازی فرآیندهای احتراقی دارد. شناسایی رژیم احتراق و ویژگی‌های سوخت آمونیاک با نیتروژن رقیق شده به همراه هوای پیش گرم شده به‌عنوان اکسید کننده شعله ضد جریان متقابل غیر پیش آمیخته توسط بطحایی و همکاران [۲۵] صورت گرفته است. در بررسی‌های این گروه، از دیدگاه رژیم احتراق برای یافتن تأثیر هر رژیم بر ساختار و انتشار شعله آمونیاک استفاده شده است. نتایج نشان می‌دهد کاهش غلظت سوخت موردنظر و دمای اکسید کننده برای دستیابی به یک رژیم احتراق مطلوب راهگشا است. بر این اساس مشخص شده است که کاهش غلظت بالای ۰/۸، برای ایجاد احتراق بدون شعله آمونیاک لازم است. وانگ و هوکا [۲۶] اثر بازجذب تابش بر تشکیل آلاینده ناکس را در شعله‌های جریان متقاطع پیش‌آمیخته با استفاده از متان به‌عنوان سوخت و هوا به‌عنوان اکسند به‌صورت عددی بررسی نموده‌اند. بنابر اظهار این گروه، بازجذب تابش ساطع شده سبب می‌شود ضخامت شعله بصورت قابل توجهی گسترده‌تر و دمای شعله نیز بالاتر از آنچه با استفاده از مدل نازک نوری محاسبه شده شود. در شعله‌های پیش مخلوط، بازجذب تشعشع تأثیر بسیار مهمی بر تشکیل ناکس دارد، این موضوع علاوه بر تولید NO، در تولید N_2O نیز صادق است. اثر بازجذب تابش با کاهش نرخ کشش و نزدیک شدن نسبت هم ارزی شعله به عدد یک در تشکیل NO قوی تر می‌شود.

در سال‌های اخیر احتراق اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن به‌عنوان روش‌های راهگشا و موثر در مهار انتشار دی‌اکسید کربن (به‌عنوان اصلی‌ترین گاز گلخانه‌ای) حاصل از احتراق به جو معرفی شده و مطالعه‌های بسیاری تحت شرایط مختلف روی آن‌ها انجام شده است. استفاده از گاز سنتز تحت رژیم‌های سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی بدون شعله می‌تواند به‌عنوان فرآیند احتراقی با حداقل انتشار آلاینده و گازهای گلخانه‌ای با استفاده از سوختی پایدار روشی موثر در شرایط بحرانی انرژی، انتشار آلاینده‌ها و گرمایش زمین بر اثر انتشار گازهای گلخانه‌ای مورد توجه قرار گیرد. علی‌رغم مطالعه‌های نسبتاً گسترده روی احتراق گاز سنتز- هوای بدون شعله، شرایط اکسیژن غنی و سوخت- اکسیژن بدون شعله با استفاده از سوخت گاز سنتز به ندرت مورد توجه محققین قرار گرفته است. مطالعه حاضر با استفاده از شبیه‌سازی شعله نفوذی جریان متقابل به‌عنوان یکی از هندسه‌های شناخته شده در بررسی‌های احتراقی، ساختار شعله گاز سنتز را تحت رژیم بدون شعله در شرایط اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن با احتراق سوخت-هوا مقایسه می‌کند. در این مطالعه که با استفاده از سه ترکیب گاز سنتز مختلف (شرایط گاز سنتز هیدروژن غنی، هیدروژن رقیق و شرایط گاز سنتز با کسر مولی برابر هیدروژن و مونوکسید کربن) انجام شده و در آن به بررسی تأثیر دمای اکسند ورودی و کسر مولی اکسیژن موجود در آن (به‌عنوان پارامترهای کلیدی در احتراق بدون شعله) روی شرایط حرارتی، ساختار شعله و تأخیر در اشتعال پرداخته شده است. در بررسی‌ها اثرات فیزیکی و شیمیایی ناشی از تغییر احتراق از سوخت-هوا به اکسیژن غنی و سوخت- اکسیژن مورد توجه قرار گرفته و سهم هر یک از اثرات شیمیایی و فیزیکی ناشی از تغییر ترکیب اکسند نیز مشخص شده است.

معادلات حاکم، هندسه و روش حل عددی شعله نفوذی جریان متقابل

شبیه‌سازی عددی مطالعه حاضر مربوط به شعله نفوذی جریان متقابل در حالت پایا است. علت انتخاب حلگر شعله نفوذی جریان متقابل، ساده‌ترین هندسه برای تشابه و امکان استفاده از این حلگر تحت شرایط احتراق بدون شعله است [۲۷]. هدف مطالعه حاضر بررسی اثر مکانیزم واکنش و پارامترهای مرتبط بر احتراق بدون شعله است. در چنین مطالعه‌ای باید عوامل غیر سینتیکی نظیر هندسه حداقل تأثیر خود را داشته باشند تا بتوان اثر سینتیک را به‌طور خالص مشاهده کرد. همچنین در مدل‌هایی نظیر مدل فلیملت که در شبیه‌سازی احتراق آشفته به‌طور عمده در کاربردهای عملی مورد استفاده قرار می‌گیرد، با استفاده از مجموعه‌ای از شعله‌های کوچک آرام انجام می‌شود که نشان از اهمیت شعله‌های غیرپیش‌آمخته آرام در شبیه‌سازی‌های صنعتی دارد. علاوه بر این در مسائلی که آگاهی از مسیرهای واکنشی و استفاده از سینتیک شیمیایی مانند مطالعه تأخیر در اشتعال، ساختار شعله و آلاینده‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است، اهمیت استفاده از شعله‌های آرام در شبیه‌سازی‌ها بیشتر مشهود خواهد بود.

میدان جریان با استفاده از حل متقارن محوری و به کمک متغیرهای تشابهی به مسئله‌ای یک بعدی کاهش یافته است. معادلات حاکم بر جریان با در نظر گرفتن متغیرهای تشابهی و توابع ویژه ارائه شده توسط لوتز و همکاران [۲۸]، شامل معادله پیوستگی، معادله اندازه حرکت، معادله انرژی و بقای گونه به ترتیب طبق روابط (۱) تا (۴) است.

$$Q(x) = \int H(x) dx \quad (1)$$

$$P + 3 \frac{H^2}{\rho} = -\frac{d}{dx} \left(\mu \frac{d}{dr} \left(\frac{H}{\rho} \right) \right) + 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{QH}{\rho} \right) \quad (2)$$

$$\rho u \frac{dT}{dx} + \frac{\rho}{c_p} \sum_k c_{p,k} Y_k U_k \frac{dT}{dx} = \frac{d}{c_p dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - \frac{1}{c_p} \sum_k h_k \dot{\omega}_k \quad (3)$$

$$\frac{d}{dx} (\rho Y_k U_k) + \rho u \frac{dY_k}{dx} = \dot{\omega}_k G_k \quad (4)$$

در معادلات بالا ظرفیت گرمایی ویژه حرارتی و خواص ترمودینامیکی دیگر از طریق چندجمله‌ای‌هایی که ضرایب آن‌ها به وسیله آزمایش‌های تجربی بدست آمده‌اند، محاسبه می‌شوند. همچنین برای محاسبه خواص انتقالی از داده‌های آزمایشگاهی به همراه معادله حالت ساترلند استفاده شده است.

اثرات تشعشعی در معادله انرژی با استفاده از مدل محدود نوری نازک^۱ تقریب زده شده است. در این مدل از رابطه (۵) برای محاسبه نرخ انتقال حرارت تشعشعی استفاده شده است.

$$\dot{Q} = -4\sigma(T^4 - T_{amb}^4) \sum X_i \alpha_i \quad (5)$$

در رابطه بالا σ ضریب استفان-بولتزمن، T دما، T_{amb} دمای محیط، X کسر مولی گونه‌ها و α ضریب جذب متوسط پلانک می‌باشند. همچنین باید اشاره کرد که از آنجایی که مدل محدودیت نوری نازک شامل بازجذب نمی‌شود، دمای محیط برای جبران اتلاف گرما با در نظر گرفتن اثر تابش برابر ۸۰۰ کلوین در نظر گرفته شده است. با توجه به مطالعه ساهو و همکاران [۲۹، ۳۰]، شرایط هندسی شعله غیرپیش‌آمیخته جریان متقابل مطالعه حاضر مطابق شکل ۱ است. سوخت و هوا از نازل‌هایی با فاصله ۱/۲۵ سانتی‌متری که دارای قطر ۳ سانتی‌متر هستند، به سمت یکدیگر پاشیده شده که در اثر برخورد گاز سنتز و اکسندة با یکدیگر، صفحه‌ای به نام صفحه سکون ایجاد می‌شود.

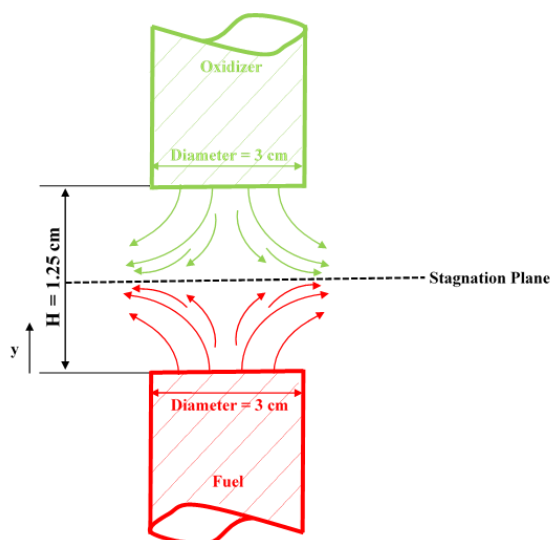


Figure 1- Schematic of counterflow diffusion flame
 شکل ۱- نمایش ترسیمی مربوط به شعله نفوذی جریان متقابل

¹ Optically Thin Limit Model

محل تشکیل این صفحه با توجه به شرایط جریان و تکانه سوخت و هوای ورودی تعیین می‌شود. برای ارتباط بین تکانه سوخت و هوای ورودی از موازنه اندازه حرکت مطابق رابطه (۵) استفاده می‌شود.

$$\rho_{ox} U_{ox}^2 = \rho_f U_f^2 \quad (6)$$

شرایط عملکردی

شرایط عملکردی مطالعه حاضر شامل دو بخش است، بخش اول مربوط به شرایط اعتبارسنجی مدل‌سازی انجام شده است و بخش دوم مربوط به شرایط بررسی‌های مختلف انجام شده برای مطالعه تأثیر دمای ورودی، ترکیب سوخت و کسر مولی اکسیژن درون اکسنده است. در بخش اعتبارسنجی، نتایج به‌دست آمده با داده‌های تجربی ساهو و همکاران [۳۱، ۳۲] مقایسه شده است که شرایط مختلف بررسی شده در جدول ۱ ارائه شده است. با توجه به داده‌های اندازه‌گیری شده توسط ساهو و همکاران و بررسی تأثیر ترکیب سوخت روی شرایط حرارتی، ساختار شعله و تأخیر در اشتعال، نمونه‌های جدول ۱ برای اعتبارسنجی انتخاب شده‌اند.

همان‌گونه که در مطالعه‌های پیشین اشاره شده است، افزایش دمای مخلوط احتراقی به بیش از دمای خوداشتعالی سوخت و رقیق‌سازی مخلوط از نظر غلظت اکسیژن موجود در آن به وسیله بازچرخش شدید محصولات احتراقی که دمای بالایی داشته و شامل مقادیر ناچیزی از اکسیژن هستند، شرایط لازم برای دستیابی به احتراق بدون شعله می‌باشند. از این‌رو و به دلیل اهمیت تأثیرات دمای ورودی و غلظت اکسیژن در ساختار اکسنده در احتراق بدون شعله، تأثیر این دو پارامتر در شرایط مختلف بررسی شده است که موارد بررسی در جداول ۲ و ۳ مشاهده می‌شوند.

جدول ۱- شرایط اعتبارسنجی مدل‌سازی فعلی

Table 1- Validation test setups

Case Number	Fuel Blend				Oxidizer Blend		
	H ₂ /CO Ratio	CO Mole Fraction (%)	H ₂ Mole Fraction (%)	CH ₄ Mole Fraction (%)	N ₂ Mole Fraction (%)	N ₂ Mole Fraction (%)	O ₂ Mole Fraction (%)
1	0.25	32	8	58	2	79	21
2	4	8	32	58	2	79	21

جدول ۲- نمونه‌های در نظر گرفته شده برای تغییرات دمای اکسنده

Table 2- Considerd cases for oxidizer temperature variations

Case Number	CO ₂ Role in Reaction	Fuel Blend			Oxidizer Blend			Oxidizer Preheating Temperature [K]
		H ₂ Mole Fraction (%)	CO Mole Fraction (%)	O ₂ Mole Fraction (%)	CO ₂ Mole Fraction (%)	N ₂ Mole Fraction (%)	VCO ₂ Mole Fraction (%)	
1		80	20	6	94	0	0	900 < T _{ox} < 1200
2		50	50	6	94	0	0	
3		20	80	6	94	0	0	
4	Activated CO ₂ (CO ₂)	80	20	6	47	47	0	
5		50	50	6	47	47	0	
6		20	80	6	47	47	0	
7		80	20	6	0	94	0	
8		50	50	6	0	94	0	
9		20	80	6	0	94	0	
10		80	20	6	0	0	94	
11	Non-Activated CO ₂ (VCO ₂)	50	50	6	0	0	94	
12		20	80	6	0	0	94	
13		80	20	6	0	47	47	
14		50	50	6	0	47	47	
15		20	80	6	0	47	47	

جدول ۳- نمونه‌های در نظر گرفته شده برای تغییرات کسر مولی اکسند
Table 3- Considered cases for O₂ mole fraction variations in oxidizer composition

Case Number	CO ₂ Role in Reaction	Fuel Blend		Oxidizer Blend			
		H ₂ Mole Fraction	CO Mole Fraction	O ₂ Mole Fraction	CO ₂ Mole Fraction	N ₂ Mole Fraction	VCO ₂ Mole Fraction
		(%)	(%)	(%)	(%)	(%)	(%)
1		80	20	4-22	96-78	0	0
2		50	50	4-22	96-78	0	0
3		20	80	4-22	96-78	0	0
4	Activated CO ₂ (CO ₂)	80	20	4-22	48-39	48-39	0
5		50	50	4-22	48-39	48-39	0
6		20	80	4-22	48-39	48-39	0
7		80	20	4-22	0	96-78	0
8		50	50	4-22	0	96-78	0
9		20	80	4-22	0	96-78	0
10		80	20	4-22	0	0	96-78
11		50	50	4-22	0	0	96-78
12	Non-Activated	20	80	4-22	0	0	96-78
13	CO ₂ (VCO ₂)	80	20	4-22	0	48-39	48-39
14		50	50	4-22	0	48-39	48-39
15		20	80	4-22	0	48-39	48-39

مطالعه اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق گونه CO₂

مشابه با مطالعات پیشین [۳۳-۳۵]، به منظور بررسی تأثیر فیزیکی و شیمیایی حضور CO₂ در ترکیب اکسید کننده، از گونه خنثی VCO₂ استفاده شده است. این گونه خنثی در زنجیره واکنش‌های شیمیایی حضور نداشته و صرفاً اثرات فیزیکی آن تحت شرایط واکنشی مورد نظر است. خواص فیزیکی گونه خنثی VCO₂ نظیر ظرفیت ویژه حرارتی، چگالی، جرم مولکولی و خواص تشعشعی کاملاً مشابه گونه فعال مربوطه است. مقایسه نتایج حاصل از تزریق گونه‌های فعال و خنثی CO₂ و VCO₂ نمایانگر تأثیر شیمیایی این تزریق و مقایسه نتایج تزریق گونه خنثی VCO₂ با نیتروژن، بیانگر تأثیر فیزیکی ناشی از جایگزینی CO₂ با نیتروژن است.

نتایج

نتایج اعتبارسنجی

در این بخش، نتایج مدل‌سازی حاضر با نتایج کار تجربی ساهو و همکاران [۳۱، ۳۲] برای توزیع دما، کسر مولی هیدروکسیل و کسر مولی اکسید نیتروژن مقایسه شده است. با توجه به اهمیت بالای سینتیک شیمیایی، چهار سینتیک متداول استفاده شده برای احتراق گاز سنتز به کار گرفته شده است. یکی از این مکانیزم‌ها C1C3 بوده که توسط رنزی و همکارانش [۳۶-۳۹] با ۱۵۹ گونه و ۲۴۵۹ واکنش توسعه یافته است. مکانیزم دیگر Syngas/NO_x است که به وسیله ژانگ و همکارانش [۴۰] ارائه شده و شامل ۴۳ گونه و ۲۵۱ واکنش است. سومین مکانیزم [۴۱] معروف به مکانیزم San Diego بوده که دارای ۳۱۱ واکنش و ۶۸ گونه متفاوت است. مکانیزم دیگر GRI3.0 [۴۲] است که دارای ۵۳ گونه و ۳۲۵ واکنش است. مقایسه میان نتایج حاصل از سینتیک‌های بیان شده با داده‌های تجربی برای نمونه‌های ۱ و ۲ از جدول ۱ در شکل ۲ نشان داده شده است. نتایج سینتیک‌های مختلف برای توزیع دما دقت بسیار خوبی داشته و در میان سینتیک‌های مورد بررسی، سینتیک San Diego مقادیر را کمتر از اندازه‌گیری‌ها نشان می‌دهد. با این حال سینتیک‌های مختلف در پیش‌بینی کسر مولی هیدروکسیل و توزیع

ناکس تفاوت‌های قابل توجهی دارند. مطابق با نتایج، سینتیک GRI3.0 با خطای متوسط کمینه نسبت به سایر مکانیسم‌ها (مقادیر خطای ۲/۵، ۵ و ۱۱ درصد برای سوخت با ۸ درصد کسر مولی هیدروژن و مقادیر خطای ۳، ۵/۵ و ۱۳ درصد برای سوخت با ۳۲ درصد کسر مولی هیدروژن) شرایط بهینه را داشته و در ادامه مطالعه از آن استفاده شده است.

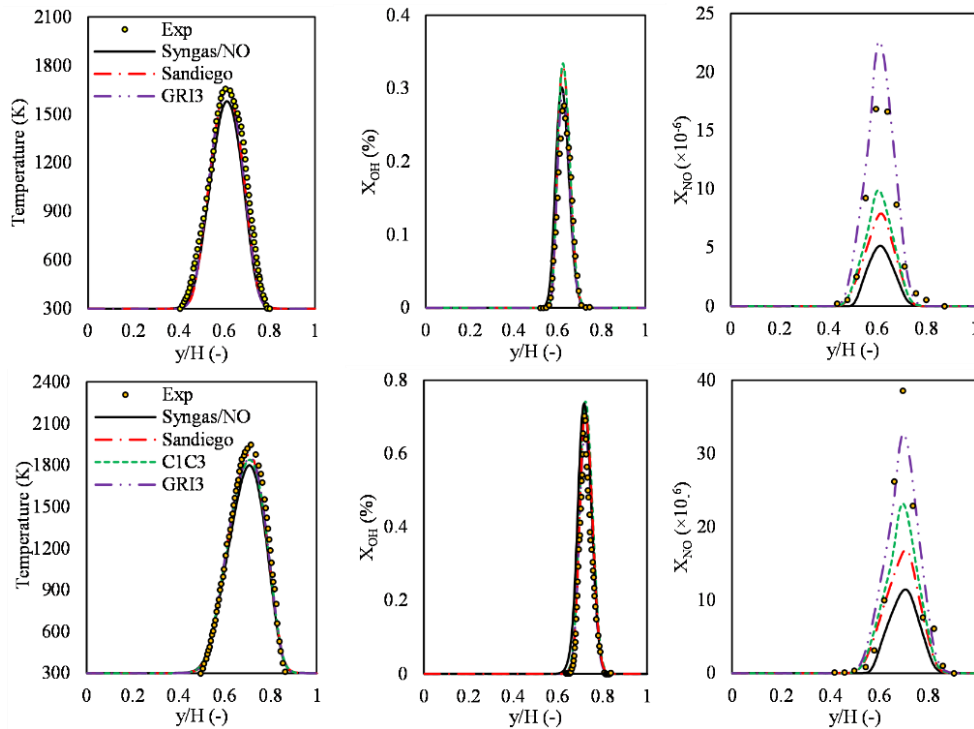


Figure 2- Comparison between experimental data and current simulation for test setups in H_2/CO ratio 8 and 32

شکل ۲- مقایسه حلگر شعله نفوذی جریان متقابل و داده‌های تجربی در نسبت H_2/CO برابر ۸ و ۳۲

مطالعه پارامترهای عملکردی

بررسی تأثیر دمای ورودی اکسنده

تأثیر دمای ورودی اکسنده روی دمای بیشینه

در شکل ۳، تغییرات دمای بیشینه برحسب دمای ورودی اکسنده تحت شرایط اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن بدون شعله در نسبت‌های H_2/CO مختلف نشان داده شده است. با افزایش دمای ورودی، دمای بیشینه احتراق نیز افزایش می‌یابد که این افزایش، زمانی که نسبت H_2/CO بزرگتر باشد، شدیدتر است. دلیل این امر نفوذ بیشتر هیدروژن و افزایش نرخ واکنش‌ها به علت هیدروژن بیشتر در دسترس در ناحیه واکنشی است. با کاهش نسبت هیدروژن به مونوکسید کربن، دمای بیشینه احتراقی نیز کاهش می‌یابد. بررسی دمای بیشینه در شرایط دمای ورودی یکسان برای احتراق سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی نشان می‌دهد که در شرایط اکسیژن غنی دمای بیشینه بالاتری ایجاد می‌شود. در واقع در رژیم سوخت-اکسیژن، کسر مولی CO_2 در ترکیب اکسنده بیشتر بوده و با توجه به ظرفیت حرارتی ویژه بالای این گونه و مشارکت آن در واکنش‌های تجزیه‌ای گرماگیر، بخشی از حرارت آزاد شده در فرآیند احتراق جذب شده و سبب کاهش دمای بیشینه نسبت به احتراق اکسیژن غنی می‌شود. با کاهش نسبت هیدروژن به مونوکسید کربن، اختلاف دمای بین رژیم‌های اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن نیز کمتر شده و دمای بیشینه هر دو حالت احتراقی به یکدیگر نزدیک می‌شود.

همان گونه که پیش تر بیان شد امکان تفکیک سهم اثرات فیزیکی و شیمیایی حاصل از حضور دی اکسید کربن در ترکیب اکسندہ روی کمیت های مختلف از جمله دمای بیشینه قابل محاسبه است که این موضوع در شکل ۳ نشان داده شده است. در تمامی ساختارهای گاز سنتز، تفاوت های فیزیکی در دماهای اکسندہ پایین تر و اثرات شیمیایی در دماهای اکسندہ بالاتر غالب هستند. در دمای اکسندہ یکسان، اثرات فیزیکی و شیمیایی حضور دی اکسید کربن برای احتراق سوخت-اکسیژن بدون شعله

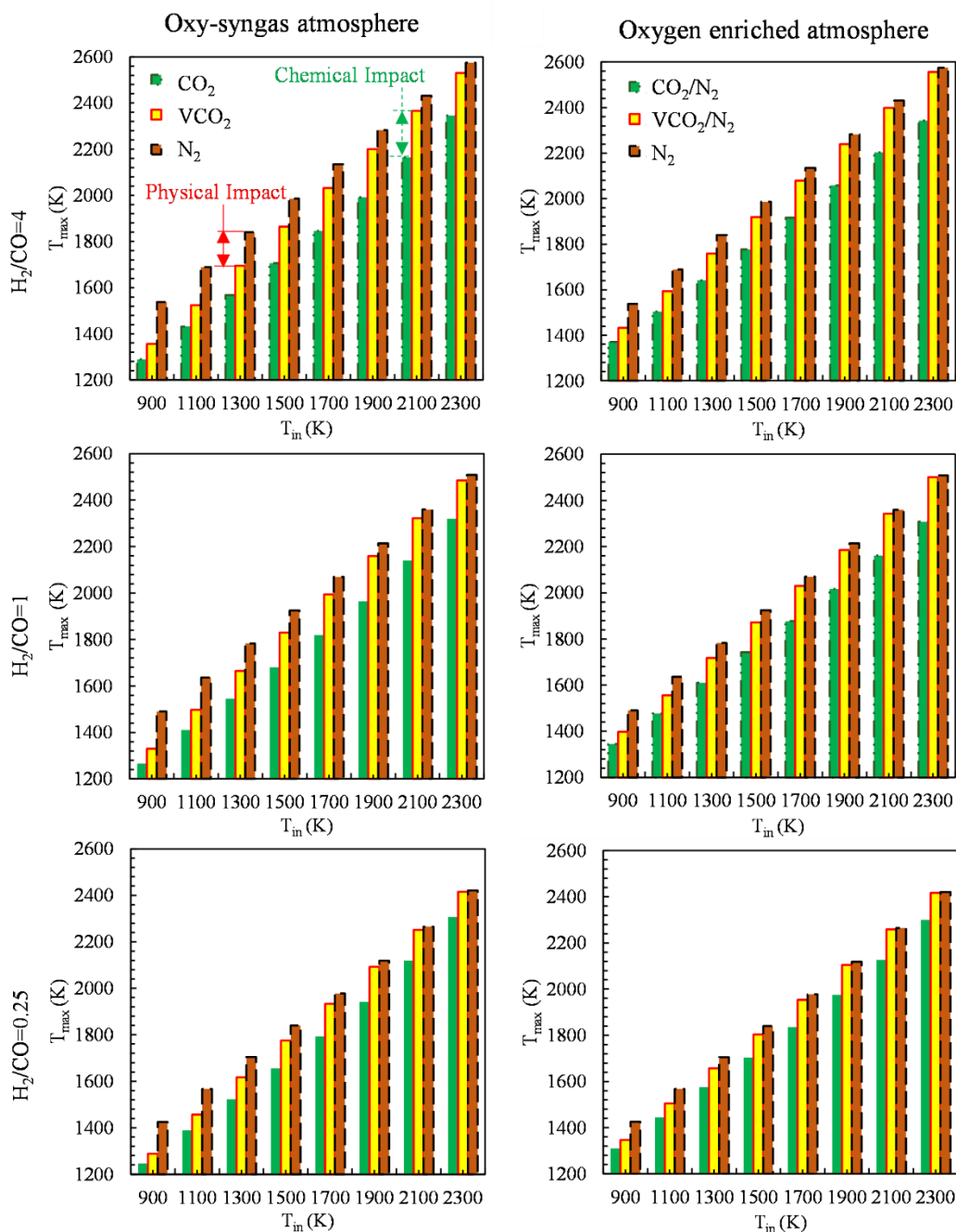


Figure 3- Graph of T_{max} versus of preheating temperature under oxy-fuel and oxygen-enriched modes in different fuel ratios a) $H_2/CO = 4$, b) $H_2/CO = 1$, and c) $H_2/CO = 0.25$

شکل ۳- نمودار دمای بیشینه بر حسب دمای ورودی اکسید کننده تحت احتراق سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی در نسبت های سوخت مختلف: الف) $H_2/CO = 4$ ، ب) $H_2/CO = 1$ و ج) $H_2/CO = 0.25$

بسیار محسوس تر از احتراق اکسیژن غنی بدون شعله است. این امر به علت افزایش سطح CO_2 جایگزین شده با N_2 در ترکیب اکسندة تحت شرایط سوخت-اکسیژن قابل انتظار است. کاهش نسبت هیدروژن به مونوکسید کربن در هر دو احتراق سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی بدون شعله منجر به کاهش اثرات شیمیایی حضور CO_2 در ترکیب اکسندة روی بیشینه دمای شعله شده است. این اتفاق به علت کاهش نرخ واکنش‌های شیمیایی در شرایط استفاده از سوخت گاز سنتز با سطح هیدروژن کمتر است. با این حال نتایج بیشینه دما بیانگر آن است که تفاوت‌های شیمیایی استفاده از CO_2 به جای N_2 در سوخت‌های گاز سنتز با H_2/CO برابر ۴ و ۱ اختلاف کمتری نسبت به سوخت‌های گاز سنتز با نسبت هیدروژن به مونوکسید کربن ۱ و ۰/۲۵ دارند. این امر حاکی از آن است که کاهش بیش از اندازه هیدروژن موجود در ساختار گاز سنتز می‌تواند منجر به تغییرات اساسی در شرایط واکنشی آن شود. در واقع می‌توان گفت که نسبت H_2/CO بحرانی وجود دارد که در مقادیر کمتر از آن به علت کاهش هیدروژن موجود در گاز سنتز و در نتیجه کاهش نرخ واکنش‌های شیمیایی (کاهش شدیدتر بیشینه دمای احتراق در شرایط گاز سنتز با نسبت هیدروژن به مونوکسید کربن ۰/۲۵ نسبت به ۱ در مقایسه با کاهش بیشینه دمای احتراق در H_2/CO برابر ۴ نسبت به ۱ نیز به علت کاهش شدیدتر نرخ واکنش‌های شیمیایی در شرایط کاهش بیش از اندازه هیدروژن موجود در گاز سنتز تحت شرایط H_2/CO برابر با یک است)، تفاوت قابل توجهی در شرایط احتراقی و مسیرهای واکنشی ایجاد می‌شود. تأثیر فیزیکی حضور دی‌اکسید کربن نیز در هر دو احتراق در شرایط یکسان نسبت H_2/CO ، با افزایش دمای ورودی کاهش یافته تا جایی که در دماهای بالا (حدود ۲۳۰۰ کلین) می‌توان از تفاوت‌های فیزیکی گونه رقیق‌ساز موجود در اکسندة چشم‌پوشی کرد. اثرات فیزیکی در احتراق سوخت-اکسیژن بیشتر از اکسیژن غنی است ولی مشابه روند تفاوت‌های شیمیایی، با کاهش نسبت H_2/CO از میزان اثر فیزیکی حضور دی‌اکسید کربن کاسته می‌شود.

تأثیر دمای ورودی اکسید کننده روی ساختار شعله

به منظور بررسی ساختار شعله، تغییرات رادیکال هیدروکسیل (OH) بررسی شده است. توزیع کسر مولی این رادیکال تحت شرایط احتراقی اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن بدون شعله با استفاده از نسبت‌های مختلف هیدروژن به مونوکسید کربن در شکل ۴ نشان داده شده است.

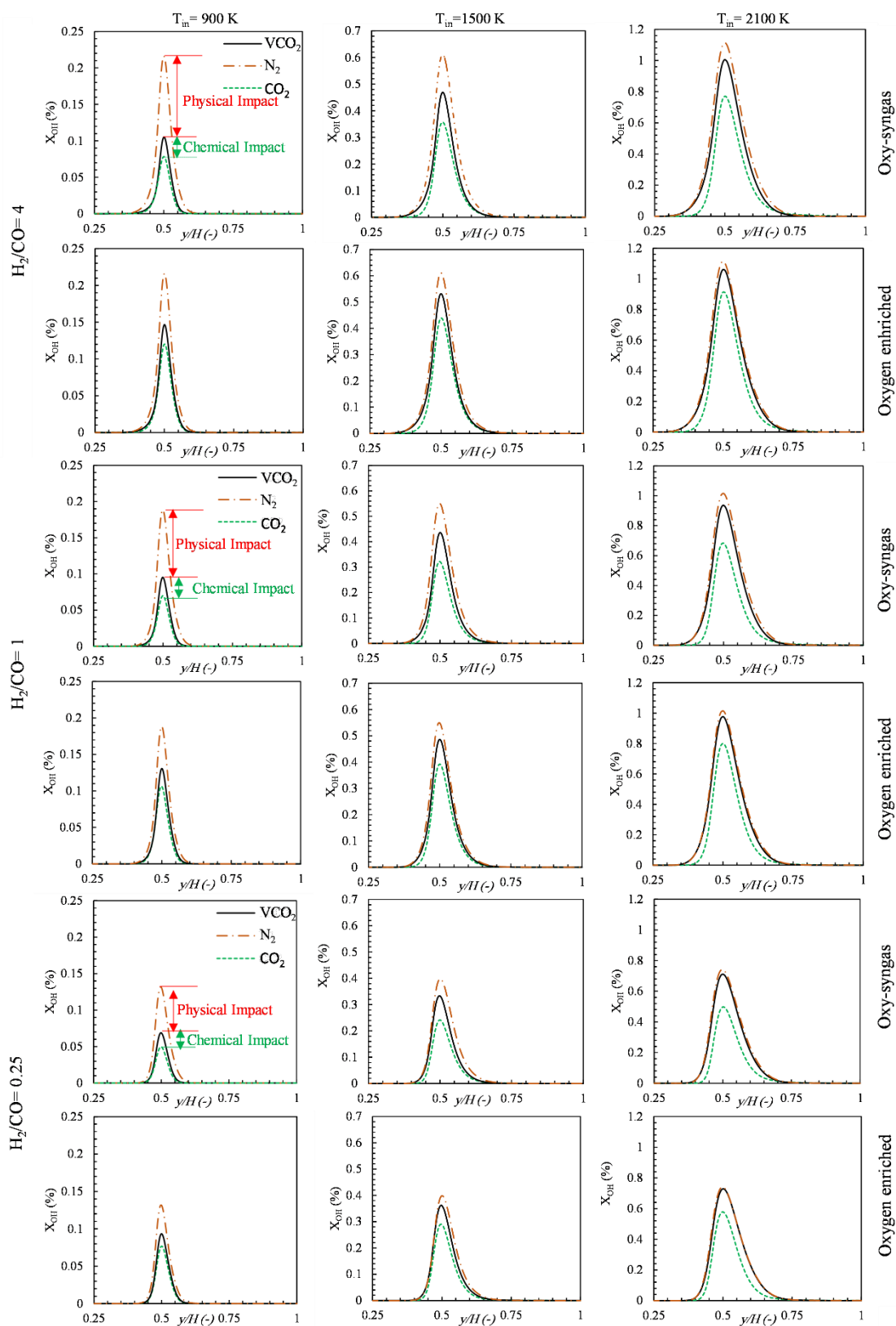


Figure 4- Hydroxyl distribution at various H_2/CO ratios and preheating temperatures

شکل ۴- نمودار کسر مولی هیدروکسیل در دماهای ورودی و نسبت‌های مختلف H_2/CO

همان‌گونه که پیش‌تر بیان شد، به منظور استقلال نتایج از محل ناحیه واکنشی، مومنتوم جریان سوخت و هوا با یکدیگر برابر بوده که منجر به محل تشکیل شعله در ناحیه میانی نازل‌های سوخت و هوا می‌شود. از این‌رو بیشینه کسر مولی رادیکال OH در شرایط مختلف در فاصله میانی بین نازل‌های اکسند و سوخت تشکیل شده است. براساس نتایج، جایگزینی CO₂ با N₂ منجر به افزایش شدید هیدروکسیل تشکیل شده در ناحیه واکنشی می‌شود که نشان دهنده افزایش نرخ واکنش‌های شیمیایی است. این افزایش در دماهای اکسند پایین‌تر و همچنین در شرایط احتراق سوخت-اکسیژن شدیدتر است که عامل آن اثرات فیزیکی و شیمیایی ناشی از تغییر ترکیب اکسند است. با افزایش دمای ورودی اکسند اثرات شیمیایی افزایش یافته و از سهم اثرات فیزیکی کاسته می‌شود. با کاهش هیدروژن سوخت در دماهای بالای ورودی اکسند، اثرات فیزیکی به تدریج کاسته شده و در نسبت H₂/CO برابر با ۰/۲۵ و دمای اکسند ورودی ۲۱۰۰ کلوین، سهم تفاوت‌های فیزیکی و حضور فعال‌تر CO₂ در واکنش‌های شیمیایی نسبت به N₂ به طور کامل از بین رفته و تمامی تأثیر ناشی از کاهش هیدروکسیل تولید شده به علت اثرات شیمیایی است. در واقع می‌توان گفت که در دماهای بالای اکسند ورودی، فعالیت فیزیکی دی‌اکسید کربن همانند نیتروژن ناچیز است. همچنین در دمای اکسند ورودی ثابت، کاهش هیدروژن گاز سنتز سبب کاهش اثرات فیزیکی ناشی از جایگزینی CO₂ با N₂ می‌شود. مقایسه بین ترکیب اکسند در حالت‌های سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی نشان می‌دهد که کسر مولی رادیکال OH در شرایط اکسیژن غنی بیشتر است. در واقع در رژیم اکسیژن غنی، غلظت دی‌اکسید کربن در ورودی کمتر شده و در نتیجه میزان جذب حرارت به وسیله CO₂ کاهش می‌یابد و حرارت آزاد شده توسط واکنش‌های شیمیایی، صرف تولید بیشتر رادیکال فعال OH می‌شود. در شرایط سوخت-اکسیژن و در دمای اکسند ورودی یکسان، هر دو تأثیر شیمیایی و فیزیکی تزریق CO₂ نقش پر رنگ‌تری در کاهش تولید رادیکال هیدروکسیل نسبت به احتراق اکسیژن غنی دارند.

تأثیر دمای ورودی بر حرارت آزاد شده و تأخیر در اشتعال

گونه فرمالدهید (CH₂O) اهمیت بسیاری در فرآیند احتراق داشته و نمایانگر میزان نرخ آزادسازی انرژی حرارت ناشی از واکنش‌های شیمیایی و مطابق با مطالعه‌های پیشین [۴۳-۴۵] به‌عنوان معیاری از تأخیر در اشتعال معرفی شده است. تغییرات مکانی رادیکال CH₂O در دماهای پیش‌گرمایش مختلف اکسند برای سه سوخت گاز سنتز در نظر گرفته شده تحت شرایط سوخت-هوا، اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن در شکل ۵ نشان داده شده است. افزایش دمای پیش‌گرمایش اکسند منجر به افزایش تولید CH₂O شده که این افزایش بیانگر آزادسازی حرارت بیشتر از واکنش‌های احتراقی است. میزان آزادسازی حرارت در شرایط اکسیژن غنی کمتر از احتراق سوخت-هوا و بیشتر از شرایط سوخت-اکسیژن است. در هر سه ترکیب سوخت در نظر گرفته شده عامل اصلی کاهش حرارت آزاد شده از واکنش‌ها در دماهای اکسند بالا، تأثیر شیمیایی ناشی از جایگزینی CO₂ با N₂ است در حالی که در دماهای اکسند پایین، اثرات فیزیکی و شیمیایی نقش تقریباً یکسانی در کاهش تولید رادیکال فرمالدهید دارند. باید توجه داشت که گاز سنتز در شرایط هیدروژن غنی کاهش بسیار بیشتری در حرارت آزاد شده نسبت به سوخت گاز سنتز در شرایط هیدروژن رقیق دارد.

افزایش دمای ورودی اکسند منجر به افزایش نرخ واکنش‌های شیمیایی شده و تأخیر در اشتعال را کاهش می‌دهد که این کاهش در هر سه شرایط احتراقی سوخت-هوا، اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن قابل مشاهده است (جابجایی محل بیشینه مقدار فرمالدهید تشکیل شده به‌عنوان معیار تأخیر در اشتعال در نظر گرفته شده است). از طرفی مطابق با شکل ۵، هر چه از میزان هیدروژن در ترکیب سوخت کاسته می‌شود، تأخیر در اشتعال کاهش یافته که نشان دهنده اهمیت سطح گونه فعال سوخت بر تأخیر در اشتعال تحت رژیم بدون شعله است. با توجه به اینکه در کاربردهای صنعتی احتراق بدون شعله به صورت عمده از بازچرخش محصولات احتراقی به منظور پیش‌گرمایش و رقیق‌سازی اکسند استفاده می‌شود، می‌توان گفت استفاده از احتراق سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی با سطح بالایی از تزریق دی‌اکسید کربن درون اکسند می‌تواند منجر به تسهیل در شرایط تشکیل این احتراق شده و سطح پیش‌گرمایش و رقیق‌سازی بیشتری را فراهم آورد. این موضوع به ویژه در شرایط استفاده از سوخت‌های گاز سنتز هیدروژن غنی می‌تواند بسیار حائز اهمیت باشد.

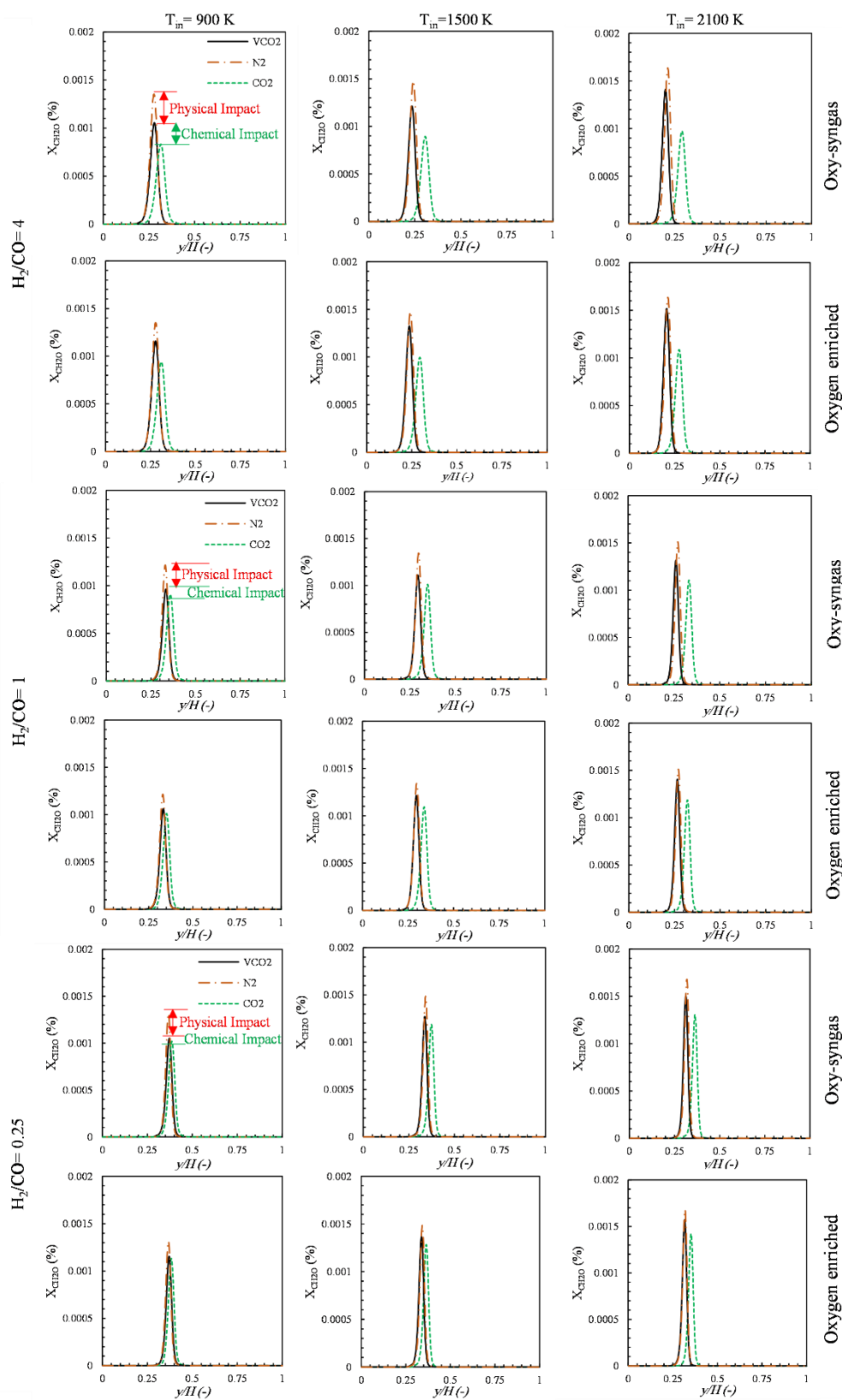


Figure 5- Formaldehyde distribution at various H_2/CO ratios and preheating temperatures

شکل ۵- نمودار کسر مولی فرمالدهید در دماهای ورودی و نسبت‌های مختلف H_2/CO

با توجه به استفاده از گونه مجازی VCO_2 در محاسبات سینتیکی انجام شده می‌توان سهم اثرات فیزیکی و شیمیایی روی آزادسازی حرارت و تأخیر در اشتعال را تفکیک نمود. با توجه به شکل ۵، تفاوت‌های فیزیکی CO_2 با N_2 در دماهای پیش‌گرمایش پایین عامل اصلی کاهش حرارت آزاد شده در شرایط اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن بدون شعله نسبت به شرایط گاز سنتز-هوای بدون شعله است؛ در حالی که افزایش دمای ورودی اکسنده سبب تغییر در مسیرهای واکنشی و در نتیجه افزایش قابل توجه سهم اثرات شیمیایی نسبت به تفاوت‌های فیزیکی می‌شود. همچنین باید اشاره کرد که هر دو اثر فیزیکی و شیمیایی در حالت هیدروژن غنی سوخت نسبت به شرایط هیدروژن رقیق نقش بیشتری در کاهش حرارت آزاد شده دارند.

بررسی تأثیر غلظت اکسیژن در ترکیب اکسنده

تأثیر روی دمای بیشینه

تغییرات دمای بیشینه فرآیند احتراق برحسب کسر مولی اکسیژن موجود در اکسنده برای شرایط احتراقی سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی در سه نسبت هیدروژن به مونوکسید کربن ۴، ۱ و ۰/۲۵ در شکل ۶ نشان داده شده است. مطابق با شکل ۶، افزایش کسر مولی اکسیژن در تمامی نسبت‌های H_2/CO سوخت و تحت هر دو حالت اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن سبب افزایش بیشینه دما شده و سهم اختلاف میان بیشینه دما ناشی از تفاوت‌های فیزیکی و شیمیایی را به صورت چشمگیری افزایش می‌دهد که این موضوع با نتایج بررسی‌های ابراهیمی و مظاهری [۴۶] در ارتباط با احتراق گاز سنتز-هوای بدون شعله تطابق خوبی دارد. عامل اصلی این افزایش که در سوخت گاز سنتز با سطح هیدروژن بالاتر موجود در ترکیب سوخت ملموس‌تر است در اثر تشدید نرخ‌های واکنشی با وجود اکسیژن بالاتر موجود در ناحیه واکنشی است. از طرفی مشابه با تغییرات دمای ورودی اکسنده، بیشینه دمای شعله در حالت سوخت-هوا رخ داده و افزایش CO_2 موجود در اکسنده سبب کاهش چشمگیر بیشینه دمایی به علت تفاوت‌های فیزیکی به ویژه ظرفیت حرارتی بالاتر دی‌اکسید کربن و همچنین اثرات شیمیایی با توجه به حضور CO_2 در واکنش‌های تجزیه‌ای و گرماگیر شده است [۴۷]. این شرایط مستقل از ترکیب گاز سنتز بوده و برای تمامی نسبت‌های هیدروژن به مونوکسید کربن صادق است. در هر دو حالت اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن می‌توان گفت که در تمامی کسرهای مولی اکسیژن اکسنده، سهم تفاوت‌های فیزیکی و شیمیایی تقریباً برابر است (در حالت احتراقی اکسیژن غنی اثرات فیزیکی به میزان کمی موثرتر از اثرات شیمیایی هستند در حالی که برای احتراق سوخت-اکسیژن سهم اثرات شیمیایی غالب است). برخلاف تأثیر دمای پیش‌گرمایش اکسنده ورودی که پیش از این بررسی شد، در حالت تغییر کسر مولی O_2 اکسنده، کاهش نسبت H_2/CO منجر به تغییرات تقریباً یکنواختی در دما برای هر سه حالت سوخت-هوا، اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن می‌شود. برای مثال، در شرایط استفاده از کسر مولی اکسیژن ۰/۱۴، دمای بیشینه احتراق سوخت-هوا برای نسبت‌های H_2/CO برابر با ۴، ۱ و ۰/۲۵ به ترتیب برابر با ۲۲۵۱، ۲۱۲۵ و ۱۹۸۹ است که بیانگر کاهش تقریباً خطی و یکنواخت دمای بیشینه با کاهش نسبت هیدروژن به مونوکسید کربن است. همچنین کاهش قابل توجه اختلاف دمای بیشینه احتراق تحت شرایط استفاده از گونه‌های N_2 ، VCO_2 و CO_2 با کاهش سطح هیدروژن گاز سنتز نشان دهنده آن است که یکی از عوامل اصلی تقویت کننده تفاوت‌های فیزیکی و شیمیایی ترکیب سوخت گاز سنتز و به طور خاص سطح هیدروژن موجود در آن بوده و عامل اصلی دیگر، کسر مولی دی‌اکسید کربن اکسنده است که تأثیر آن با مقایسه حالات احتراقی اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن قابل مشاهده است. همچنین باید اشاره کرد که تغییرات دمای بیشینه با افزایش کسر مولی اکسیژن اکسنده برخلاف دمای پیش‌گرمایش اکسنده خطی نبوده و با شیبی کند شونده افزایش می‌یابد. در نتیجه می‌توان گفت که در مقایسه میان دمای پیش‌گرمایش ورودی و کسر مولی اکسیژن اکسنده به‌عنوان پارامترهای کلیدی و موثر بر رژیم احتراقی بدون شعله، دمای پیش‌گرمایش تأثیر بیشتری بر جریان واکنشی داشته و در صورت نیاز به تغییرات شدید باید از آن بهره‌گیری کرد در حالی که تغییر در کسر مولی اکسیژن اکسنده قابلیت کنترلی بیشتری از فرآیند احتراق را ممکن می‌سازد.

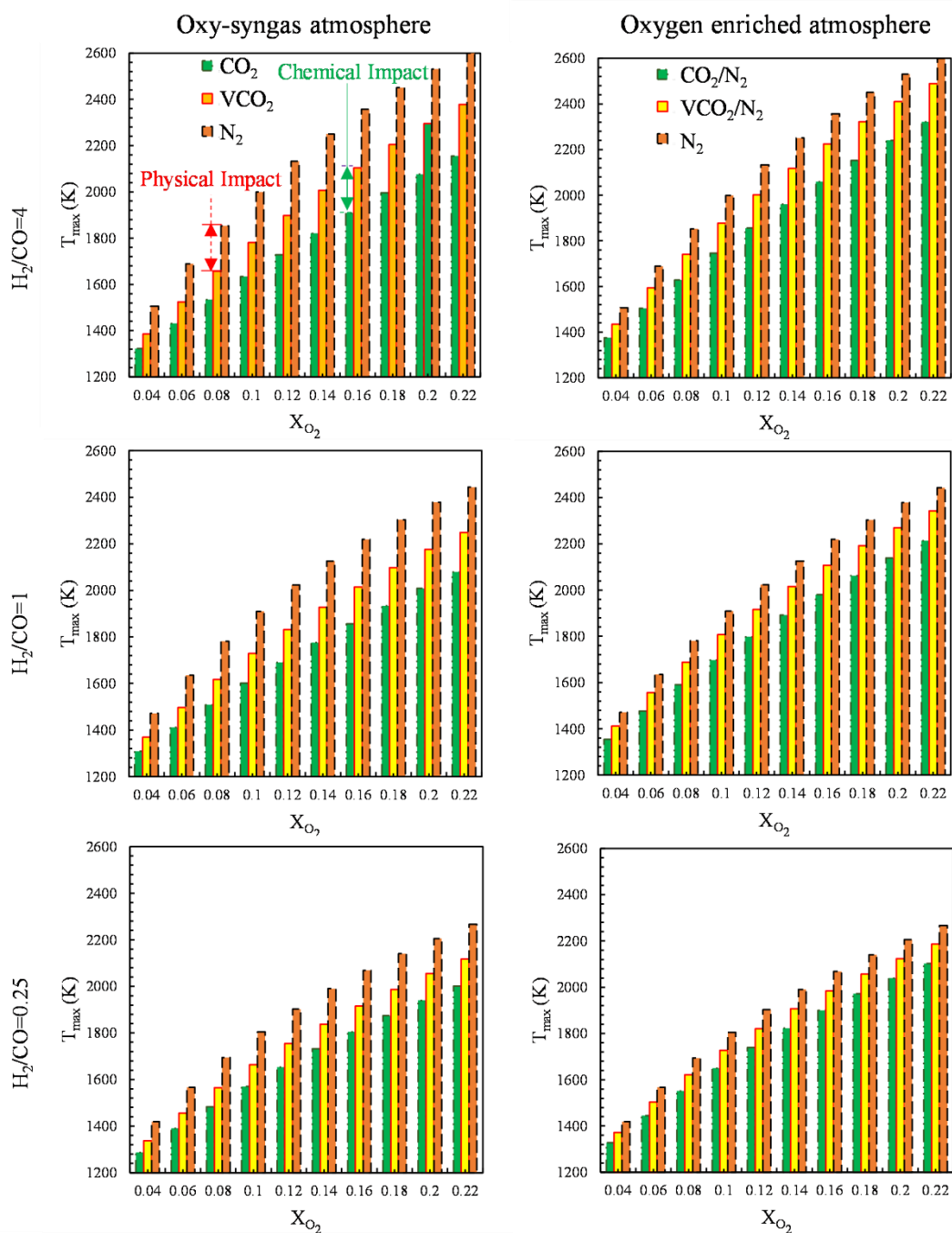


Figure 6- Graph of T_{max} in terms of oxygen mole fraction under oxy-fuel and oxygen enriched modes in different fuel ratios a) $H_2/CO = 4$, b) $H_2/CO = 1$, and c) $H_2/CO = 0.25$

شکل ۶- نمودار دمای بیشینه بر حسب کسر مولی اکسیژن اکسندہ تحت شرایط اکسیژن-سوخت و اکسیژن غنی در نسبت‌های سوخت مختلف: الف) $H_2/CO = 4$ ، ب) $H_2/CO = 1$ ، ج) $H_2/CO = 0.25$

تأثیر روی ساختار شعله

شکل ۷ تأثیر غلظت اکسیژن موجود درون اکسندہ بر توزیع رادیکال هیدروکسیل تحت شرایط احتراق اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن برای سه نسبت مختلف هیدروژن به مونوکسید کربن ۴، ۱ و ۰/۲۵ نشان می‌دهد.

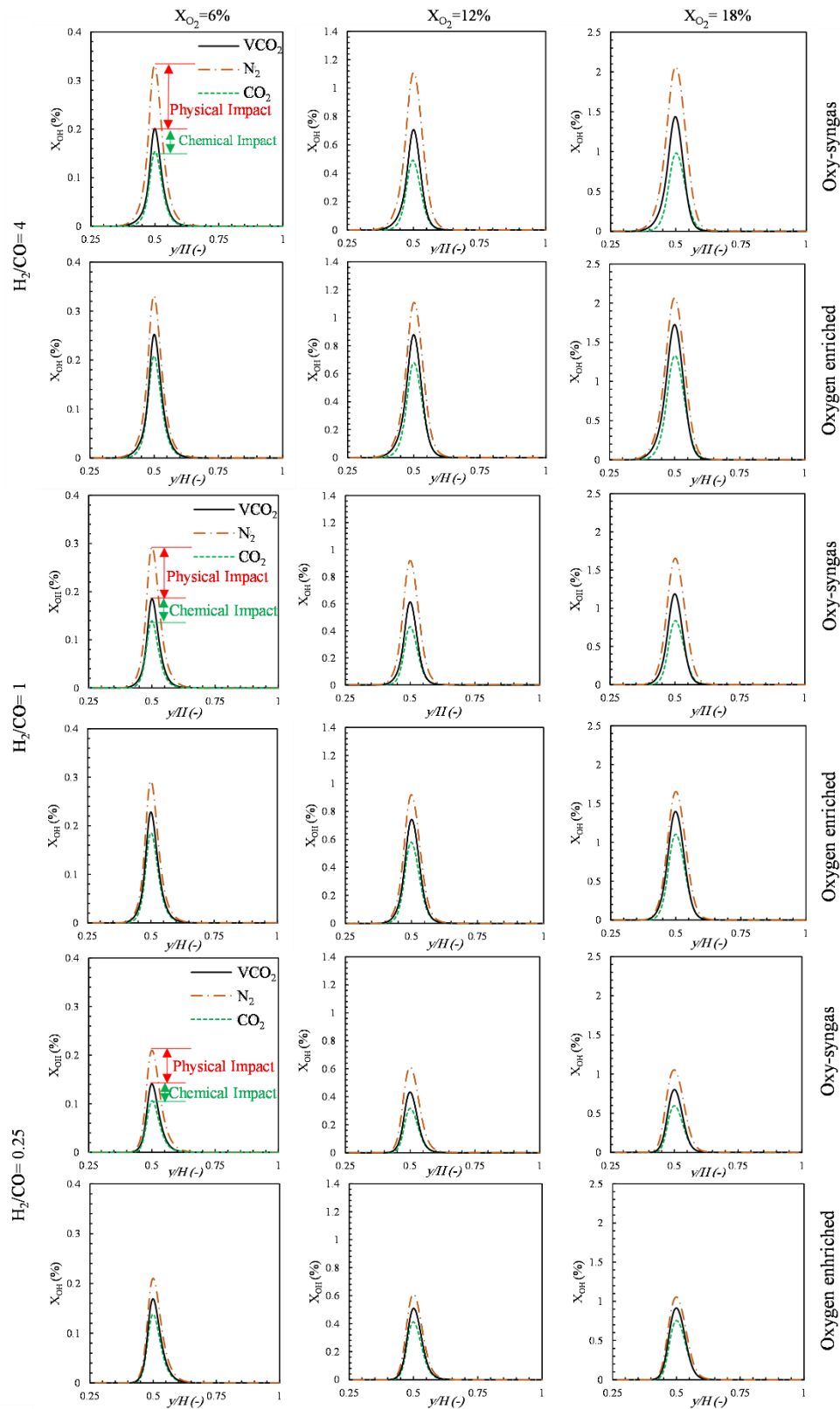


Figure 7- Hydroxyl distribution at various H_2/CO ratios and O_2 mole fraction

شکل ۷- تغییرات OH تحت کسر مولی اکسیژن و نسبت سوخت مختلف

همان گونه که مشاهده می شود با افزایش کسر مولی اکسیژن موجود در اکسنده، بیشینه رادیکال هیدروکسیل به صورت قابل توجهی افزایش می یابد که علت آن افزایش سطح اکسیژن موجود و در نتیجه آن افزایش نرخ واکنش های شیمیایی است. مشابه با شرایط دمای پیش گرمایش اکسنده، تغییر ترکیب سوخت از H_2/CO برابر ۴ به H_2/CO برابر ۱، توزیع رادیکال OH و بیشینه مقدار آن دستخوش تغییرات شدیدی نشده و برای کسر مولی های مختلف اکسیژن موجود در اکسنده، بیشینه رادیکال هیدروکسیل حدود ۱۰ درصد تغییر دارد. کاهش بیشتر هیدروژن در ترکیب سوخت سبب می شود تا بیشینه رادیکال هیدروکسیل به صورت قابل توجهی (حدود ۵۰ درصد) کاهش یابد. در واقع کاهش بیش از اندازه هیدروژن موجود در گاز سنتز منجر به کاهش شدید نرخ های واکنشی می شود. کاهش نرخ های واکنشی که منجر به کاهش بیشینه دما می شود، می تواند در کاربردهای با سطح اکسیژن بالای مخلوط احتراقی منجر به تسهیل در تشکیل رژیم احتراقی بدون شعله شود. به عبارت دیگر استفاده از ترکیب هیدروژن رقیق سوخت گاز سنتز برای شرایط اکسنده ورودی پیش گرم شده با سطح اکسیژن بالا در تشکیل رژیم احتراق بدون شعله کارآمد است.

کاهش شدید غلظت رادیکال هیدروکسیل با تغییر ترکیب اکسنده در شرایط اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن نسبت به شرایط احتراق گاز سنتز-هوا مشاهده می شود. بیشینه رادیکال هیدروکسیل تحت شرایط سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی در تمامی نسبت های هیدروژن به مونوکسید کربن به ترتیب حدود ۵۰ و ۳۵ درصد کاهش می یابد. مطابق با شکل ۷، علت اصلی کاهش هیدروکسیل تولید شده تحت شرایط سوخت-اکسیژن اثرات فیزیکی ناشی از حضور فعال دی اکسید کربن در واکنش های شیمیایی و برای احتراق اکسیژن غنی اثرات توامان فیزیکی و شیمیایی است که سهم تقریباً یکسانی در کاهش رادیکال هیدروکسیل تولید شده دارند. کاهش کسر مولی CO_2 اکسنده در احتراق اکسیژن غنی تأثیر زیادی بر سهم تفاوت های فیزیکی نسبت به احتراق سوخت-اکسیژن ندارد، اما اثرات اثرات فیزیکی حضور دی اکسید کربن را کاهش داده و سبب می شود تا سهم اثرات فیزیکی و شیمیایی تحت احتراق اکسیژن غنی تقریباً یکسان باشد.

تأثیر کسر مولی اکسیژن اکسنده روی میزان حرارت آزاد شده و تأخیر در اشتعال

در شکل ۸ تأثیر کسر مولی اکسیژن اکسنده بر توزیع رادیکال فرمالدهید برای سه ترکیب گاز سنتز مختلف تحت شرایط سوخت-هوا، اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن نشان داده شده است. افزایش کسر مولی اکسیژن و سطح هیدروژن موجود در سوخت منجر به افزایش بیشینه مقدار CH_2O شده که بیانگر آزادسازی حرارت بیشتر از واکنش های شیمیایی است. همان طور که مشخص است در مقادیر O_2 پایین موجود در اکسنده تحت شرایط هیدروژن غنی گاز سنتز اثرات شیمیایی نقش اصلی و عمده را در کاهش آزادسازی حرارت احتراق سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی ایفا می کنند در حالی که برای شرایط H_2/CO برابر با ۱ و ۰/۲۵ اثرات فیزیکی نقش اصلی را در کاهش حرارت آزاد شده دارند. از طرفی افزایش سطح اکسیژن موجود در اکسنده سبب کاهش اثرات شیمیایی روی آزادسازی حرارت آزاد شده از واکنش های شیمیایی می شود.

کاهش هیدروژن موجود در سوخت سبب افزایش شدید فاصله محوری آغاز واکنش های شیمیایی در یک کسر مولی اکسیژن مشخص می شود. این افزایش برای شرایط احتراق سوخت-اکسیژن با کسر مولی اکسیژن ۶ درصد به گونه ای است که سبب افزایش فاصله محوری اشتعال از ۰/۳۷ در نسبت H_2/CO برابر ۴ به ۰/۴۳ و ۰/۴۸ به ترتیب برای نسبت هیدروژن به مونوکسید کربن ۱ و ۰/۲۵ می شود. برای ترکیب H_2/CO برابر ۴ و مقادیر کسر مولی اکسیژن ۶، ۱۲ و ۱۸ درصد درون اکسنده، فاصله محوری اشتعال در شرایط سوخت-اکسیژن به ترتیب برابر با ۰/۴، ۰/۳۹ و ۰/۳۷۵ است. مقایسه میان تأثیر هیدروژن موجود در سوخت و کسر مولی اکسیژن اکسنده نشان دهنده آن است که ترکیب سوخت اهمیت بسیار بیشتری نسبت به اکسنده در مطالعه تأخیر در اشتعال دارد.

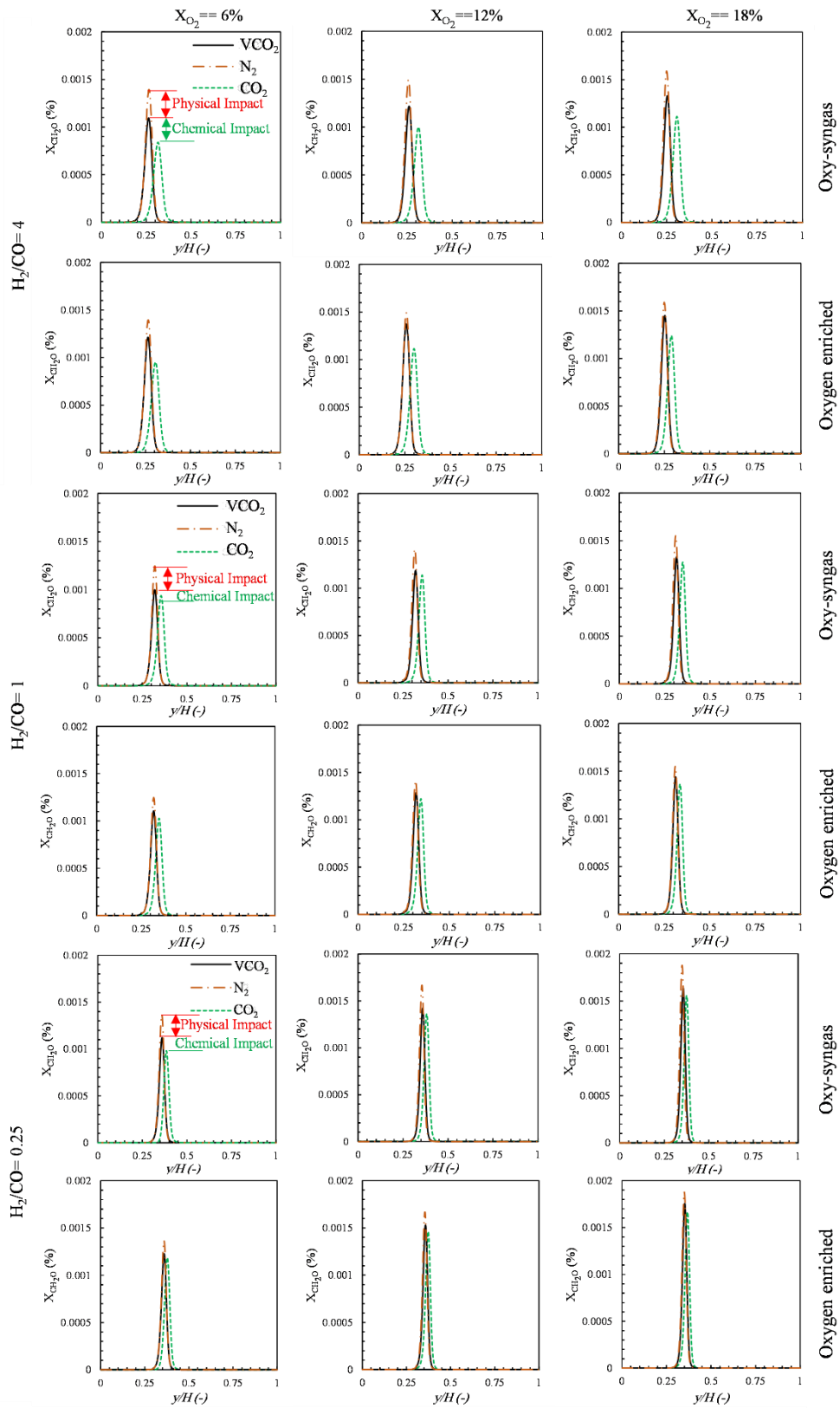


Figure 8- Formaldehyde distribution at various H_2/CO ratios and O_2 mole fraction

شکل ۸- تغییرات CH_2O با کسر مولی اکسیژن و نسبت سوخت مختلف

نتیجه گیری

در مطالعه جاری امکان استفاده از فناوری احتراق بدون شعله برای سه ترکیب مختلف سوخت گاز سنتز (با نسبت‌های H_2/CO برابر ۰/۲۵، ۱ و ۴) تحت شرایط سوخت-هوا، سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی بررسی شده است. بدین منظور با استفاده از شعله نفوذی جریان تأثیر پارامترهایی نظیر دمای پیش گرمایش و غلظت اکسیژن در ساختار اکسنده ارائه شده است. اعتبارسنجی انجام شده نشان از تطابق مکانیزم GRI3.0 با نتایج تجربی مشابه است. خلاصه نتایج بدست آمده در تحقیق فعلی در ادامه بیان شده است.

- اثرات فیزیکی در دماهای اکسنده پایین‌تر و اثرات شیمیایی در دماهای اکسنده بالاتر غالب هستند که این موضوع حاکی از اهمیت بالای دمای پیش گرمایش در شرایط استفاده از سوخت گاز سنتز است. لازم بذکر است، سهم تغییرات فیزیکی و شیمیایی ناشی از جایگزینی N_2 با CO_2 در تغییرات دمای بیشینه احتراق، تقریباً مشابه تغییرات مذکور در کاهش و افزایش کسر مولی اکسیژن در ساختار اکسنده است.
- افزایش غلظت CO_2 تولید شده در زنجیره واکنش‌های شیمیایی در ناحیه واکنش سبب افزایش تأخیر در اشتعال شده است که این موضوع سبب تسهیل در دستیابی به شرایط احتراق بدون شعله می‌شود که این شرایط عموماً به واسطه بازچرخش محصولات احتراقی با افزایش سطح رقیق‌سازی و دمای پیش گرمایش مخلوط احتراقی به وقوع می‌پیوندد. این دستاورد به خصوص در کاربردهای صنعتی احتراق بدون شعله بسیار مورد توجه است بررسی‌های صورت گرفته نشان می‌دهد استفاده از سوخت سینگر با درصد پایین هیدروژن، امکان ایجاد این نوع شرایط احتراقی را تسهیل می‌نماید. مقایسه میان تأثیر هیدروژن موجود در سوخت و کسر مولی اکسیژن اکسنده نشان دهنده آن است که ترکیب سوخت اهمیت بسیار بیشتری نسبت به اکسنده در مطالعه تأخیر در اشتعال دارد.
- تفاوت‌های فیزیکی CO_2 با N_2 عامل اصلی در کاهش دمای بیشینه احتراق در دماهای پیش گرمایش پایین اکسنده با انتقال از احتراق گاز سنتز-هوا به گاز سنتز-اکسیژن بدون شعله است. در شرایط یکسان نسبت H_2/CO تأثیر فیزیکی حضور دی‌اکسید کربن نیز در هر دو شرایط احتراق (اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن)، با افزایش دمای ورودی کاهش یافته به گونه‌ای که می‌توان از تفاوت‌های فیزیکی گونه رقیق‌ساز موجود در اکسنده در دماهای بالا (حدود ۲۳۰۰ کلوین) چشم‌پوشی کرد. اثرات فیزیکی در احتراق اکسیژن غنی کمتر از سوخت-اکسیژن است، ولی با کاهش نسبت H_2/CO از میزان اثر فیزیکی حضور دی‌اکسید کربن کاسته می‌شود.
- مقایسه میان کسر مولی اکسیژن اکسنده و دمای پیش گرمایش ورودی به‌عنوان پارامترهای کلیدی و موثر بر رژیم احتراقی بدون شعله بیانگر این مطلب است که دمای پیش گرمایش تأثیر بیشتری بر جریان واکنشی نظیر تأخیر در اشتعال، حرارت آزاد شده و ساختار شعله دارد. این شرایط همچنین در تغییر سهم شیمیایی و فیزیکی ناشی از جایگزینی CO_2 با N_2 در دما و همچنین تولید گونه‌های هیدروکسیل و فرمالدهید مشهود است.
- بررسی ساختار شعله در اثر تغییر در کسر مولی اکسیژن نشان از غلبه اثرات فیزیکی در مقادیر کم اکسیژن است، در حالی که افزایش کسر مولی اکسیژن با سهم مساوی از اثرات فیزیکی و شیمیایی در تولید گونه هیدروکسیل و نرخ واکنش شیمیایی همراه خواهد بود. همچنین تغییرات دمای بیشینه با افزایش کسر مولی اکسیژن اکسنده برخلاف دمای پیش گرمایش اکسنده به‌صورت غیرخطی بوده و با شیئی کند شونده افزایش می‌یابد.

منابع

- [1] A. Franco and A. R. Diaz, "The future challenges for "clean coal technologies": joining efficiency increase and pollutant emission control," *Energy*, vol. 34, pp. 348-354, 2009.
- [2] D. E. Giles, S. Som, and S. K. Aggarwal, "NOx emission characteristics of counterflow syngas diffusion flames with airstream dilution," *Fuel*, vol. 85, pp. 1729-1742, 2006.

- [3] Y. Richardson, J. Blin, and A. Julbe, "A short overview on purification and conditioning of syngas produced by biomass gasification: catalytic strategies, process intensification and new concepts," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 38, pp. 765-781, 2012.
- [4] K. Safer, F. Tabet, A. Ouadha, M. Safer, and I. Gökalp, "Combustion characteristics of hydrogen-rich alternative fuels in counter-flow diffusion flame configuration," *Energy conversion and management*, vol. 74, pp. 269-278, 2013.
- [5] Z. Sun and C. Xu, "Turbulent burning velocity of stoichiometric syngas flames with different hydrogen volumetric fractions upon constant-volume method with multi-zone model," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 45, pp. 4969-4978, 2020.
- [6] A. Chinnici, G. Nathan, and B. Dally, "Experimental and numerical study of the influence of syngas composition on the performance and stability of a laboratory-scale MILD combustor," *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 115, p. 110083, 2020.
- [7] G. Pio, A. Ricca, V. Palma, and E. Salzano, "Experimental and numerical evaluation of low-temperature combustion of bio-syngas," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 45, pp. 1084-1095, 2020.
- [8] H. A. Yepes, J. E. Obando, and A. A. Amell, "The effect of syngas addition on flameless natural gas combustion in a regenerative furnace," *Energy*, vol. 252, p. 124008, 2022.
- [9] E. E. Fordoei, K. Mazaheri, and A. Mohammadpour, "Effects of hydrogen addition to methane on the thermal and ignition delay characteristics of fuel-air, oxygen-enriched and oxy-fuel MILD combustion," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 46, pp. 34002-34017, 2021.
- [10] A. Cavaliere and M. De Joannon, "Mild combustion," *Progress in Energy and Combustion science*, vol. 30, pp. 329-366, 2004.
- [11] F. Chitgarha and A. Mardani, "Assessment of steady and unsteady flamelet models for MILD combustion modeling," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 43, pp. 15551-15563, 2018.
- [12] P. Li, J. Mi, B. Dally, F. Wang, L. Wang, Z. Liu, *et al.*, "Progress and recent trend in MILD combustion," *Science China Technological Sciences*, vol. 54, pp. 255-269, 2011.
- [13] A. Mardani and S. Tabejamaat, "Effect of hydrogen on hydrogen-methane turbulent non-premixed flame under MILD condition," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 35, pp. 11324-11331, 2010.
- [14] E. Ebrahimi Fordoei and K. Mazaheri, "Numerical study of the effect of carbon dioxide injection on flame structure in flameless combustion regime," *Fuel and Combustion*, vol. 13, pp. 1-26, 2020.
- [15] M. H. Moghadasi, R. Riazi, and A. Mardani, "The effect of pre-heating and dilution level on the combustion field and flue gas composition of an oxy-MILD combustion system in a laboratory- scale furnace," *Fuel and Combustion*, vol. 12, pp. 53-71, 2019.
- [16] M. Atarzadeh, S. A. Hashemi, and E. Ebrahimi Fordoei, "Numerical study of the effect of wall thermal conditions and oxidant structure on the flame structure and combustion regime in non-premixed combustion furnace," *Fuel and Combustion*, vol. 14, pp. 98-122, 2021.
- [17] M. Huang, H. Deng, Y. Liu, B. Zhang, S. Cheng, X. Zhang, *et al.*, "Effect of fuel type on the MILD combustion of syngas," *Fuel*, vol. 281, p. 118509, 2020.
- [18] M. Huang, Z. Zhang, W. Shao, Y. Xiong, Y. Liu, F. Lei, *et al.*, "Effect of air preheat temperature on the MILD combustion of syngas," *Energy conversion and management*, vol. 86, pp. 356-364, 2014.
- [19] M. Huang, Y. Xiao, Z. Zhang, W. Shao, Y. Xiong, Y. Liu, *et al.*, "Effect of air/fuel nozzle arrangement on the MILD combustion of syngas," *Applied Thermal Engineering*, vol. 87, pp. 200-208, 2015.
- [20] A. Mardani and H. K. M. Mahalegi, "Hydrogen enrichment of methane and syngas for MILD combustion," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 44, pp. 9423-9437, 2019.
- [21] M. Huang, Z. Zhang, W. Shao, Y. Xiong, F. Lei, and Y. Xiao, "MILD combustion for hydrogen and syngas at elevated pressures," *Journal of Thermal Science*, vol. 23, pp. 96-102, 2014.
- [22] M.-m. Huang, W.-w. Shao, Y. Xiong, Y. Liu, Z.-d. Zhang, F.-l. Lei, *et al.*, "Effect of fuel injection velocity on MILD combustion of syngas in axially-staged combustor," *Applied thermal engineering*, vol. 66, pp. 485-492, 2014.
- [23] S. M. Mousavi, B. J. Lee, J. Kim, F. Sotoudeh, B. Chun, D. Jun, *et al.*, "On the effects of adding syngas to an ammonia-MILD combustion regime—A computational study of the reaction zone structure," *International Journal of Hydrogen Energy*, 2023.
- [24] L. Lopez, A. Giusti, E. Gutheil, and H. Olguin, "On the effects of the fuel injection phase on heat release and soot formation in counterflow flames," *Energy*, vol. 254, p. 124306, 2022.
- [25] S. M. Bathaei, M. P. G. Maab, G. Z. Ghaeini, M. Kim, J. A. Esfahani, and K. C. Kim, "Combustion regime identification and characteristics of nitrogen-diluted ammonia with hot air oxidizer: Non-premixed counterflow flame," *Thermal Science and Engineering Progress*, vol. 39, p. 101722, 2023.
- [26] J. Wang and T. Nioka, "Numerical study of radiation reabsorption effect on NOx formation in CH4/air counterflow premixed flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, pp. 2211-2217, 2002.
- [27] M. De Joannon, G. Sorrentino, and A. Cavaliere, "MILD combustion in diffusion-controlled regimes of hot diluted fuel," *Combustion and Flame*, vol. 159, pp. 1832-1839, 2012.
- [28] A. Lutz, R. Kee, J. Grcar, and F. Rupley, "A Fortran Program for computing opposed flow diffusion flames, report No.," SAND96-8243, Sandia National Laboratories, 1996.
- [29] K. Safer, F. Tabet, and M. Safer, "A numerical investigation of structure and NO emissions of turbulent syngas diffusion flame in counter-flow configuration," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 41, pp. 3208-3221, 2016.

- [30] M. Safer, F. Tabet, A. Ouadha, and K. Safer, "A numerical investigation of structure and emissions of oxygen-enriched syngas flame in counter-flow configuration," *international journal of hydrogen energy*, vol. 40, pp. 2890-2898, 2015.
- [31] A. Sahu, S. Krishna, and R. Ravikrishna, "Quantitative OH measurements and numerical investigation of H₂/CO kinetics in syngas-air counterflow diffusion flames," *Fuel*, vol. 193, pp. 119-133, 2017.
- [32] A. B. Sahu and R. Ravikrishna, "Quantitative LIF measurements and kinetics assessment of NO formation in H₂/CO syngas-air counterflow diffusion flames," *Combustion and Flame*, vol. 173, pp. 208-228, 2016.
- [33] Y. Tu, M. Xu, D. Zhou, Q. Wang, W. Yang, and H. Liu, "CFD and kinetic modelling study of methane MILD combustion in O₂/N₂, O₂/CO₂ and O₂/H₂O atmospheres," *Applied energy*, vol. 240, pp. 1003-1013, 2019.
- [34] 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*, vol. 31, pp. 3270-3280, 2017.
- [35] Y. Tu, K. Su, H. Liu, S. Chen, Z. Liu, and C. Zheng, "Physical and chemical effects of CO₂ addition on CH₄/H₂ flames on a Jet in Hot Coflow (JHC) burner," *Energy & Fuels*, vol. 30, pp. 1390-1399, 2016.
- [36] G. Bagheri, E. Ranzi, M. Pelucchi, A. Parente, A. Frassoldati, and T. Faravelli, "Comprehensive kinetic study of combustion technologies for low environmental impact: MILD and OXY-fuel combustion of methane," *Combustion and flame*, vol. 212, pp. 142-155, 2020.
- [37] 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*, vol. 162, pp. 1679-1691, 2015.
- [38] E. Ranzi, A. Frassoldati, A. Stagni, M. Pelucchi, A. Cuoci, and T. Faravelli, "Reduced kinetic schemes of complex reaction systems: fossil and biomass- derived transportation fuels," *International Journal of Chemical Kinetics*, vol. 46, pp. 512-542, 2014.
- [39] Y. Song, L. Marrodán, N. Vin, O. Herbinet, E. Assaf, C. Fittschen, *et al.*, "The sensitizing effects of NO₂ and NO on methane low temperature oxidation in a jet stirred reactor," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 37, pp. 667-675, 2019.
- [40] Y. Zhang, O. Mathieu, E. L. Petersen, G. Bourque, and H. J. Curran, "Assessing the predictions of a NO_x kinetic mechanism on recent hydrogen and syngas experimental data," *Combustion and Flame*, vol. 182, pp. 122-141, 2017.
- [41] U. o. C. a. S. Diego, "Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications," ed: Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), 2016.
- [42] G. P. Smith, "GRI-3.0," http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, 2000.
- [43] N. Donohoe, A. Heufer, W. K. Metcalfe, H. J. Curran, M. L. Davis, O. Mathieu, *et al.*, "Ignition delay times, laminar flame speeds, and mechanism validation for natural gas/hydrogen blends at elevated pressures," *Combustion and Flame*, vol. 161, pp. 1432-1443, 2014.
- [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*, vol. 148, pp. 48-61, 2007.
- [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*, vol. 33, pp. 7553-7564, 2008.
- [46] E. E. Fordoei and K. Mazaheri, "Effects of preheating temperature and dilution level of oxidizer, fuel composition and strain rate on NO emission characteristics in the syngas moderate or intense low oxygen dilution (MILD) combustion," *Fuel*, vol. 285, p. 119118, 2021.
- [47] A. Shaker, S. A. Hashemi, and E. E. Fordoei, "Numerical study of the O₂/CO₂, O₂/CO₂/N₂, and O₂/N₂-syngas MILD combustion: Effects of oxidant temperature, O₂ mole fraction, and fuel blends," *International Journal of Hydrogen Energy*, 2023.

English Abstract

Numerical simulation of the syngas flame structure under air-fuel, oxygen enriched, and oxy-fuel regimes with flameless combustion: the impacts of fuel composition, preheating temperature, and oxygen mole fraction

Ahmad Shaker¹, Seyed Abdolmahdi Hashemi^{2*}, Esmail Ebrahimi Fordoei³

1- Department of Mechanical Engineering, Kashan University, Isfahan, Iran, Ahmad.Shaker@kashanu.ac.ir

2- Department of Mechanical Engineering, Kashan University, Isfahan, Iran, hashemi@kashanu.ac.ir

3- Department of Mechanical Engineering, Tafresh University, Tafresh, Iran, ebrahimifordoei@tafreshu.ac.ir

*Corresponding author

(Received: 2023/02/24, Received in revised form: 2023/07/05, Accepted: 2023/07/10)

In the present study, the influence of the oxidizer preheating temperature and oxygen mass fraction as the effective parameters on the flameless combustion under oxy-syngas, air-syngas, and oxygen-enriched conditions have been investigated. The simulations have been carried out with applying the counter-flow diffusion flame solver using GRI3.0 chemical kinetics. In order to separate the physical and chemical impacts of substituting CO₂ with N₂, a virtual species (VCO₂) has been used with physical properties similar to CO₂ without being present in the reactions chain. According to the obtained results, physical and chemical impacts are dominant for lower preheating temperatures and higher preheating temperatures, respectively. The investigation of ignition delay time shows that under oxy-syngas conditions, increasing the H₂/CO ratio from 0.25 to 1 and from 1 to 4 leads to a decrease in the axial distance of ignition from 0.4 cm to 0.39 cm and it changes from 0.39 cm to 0.375 cm, respectively. The comparison between the oxygen mole fraction and the inlet preheating temperature indicates that the preheating temperature has a greater effect on the reactive flow structure parameters such as ignition delay and released heat.

Keywords: Syngas fuel, Flameless combustion, Numerical study, Chemical and physical impacts, Chemical kinetic