

تاثیر دمای پیش گرم و میزان رقیق سازی بر میدان احتراقی و ترکیب محصولات در احتراق ترکیبی oxy-MILD در یک محفظه آزمایشگاهی

محمدحسن مقدسی^۱، روزبه ریاضی^{۲*}، صادق تابع جماعت^۳ و امیر مردانی^۴

۱- دانشجوی مقطع دکتری، مهندسی هوافضا، دانشگاه تهران، تهران، mh.moghadas@ut.ac.ir

۲- دانشیار، مهندسی هوافضا، دانشگاه تهران، تهران، ro_riazi@ut.ac.ir

۳- استاد، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، sadegh@aut.ac.ir

۴- دانشیار، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، Amardani@sharif.edu

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۹۷/۹/۲۲، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۷/۱۲/۱۱، پذیرش: ۹۸/۱/۵)

چکیده: در این تحقیق، ترکیبی از دو تکنولوژی احتراق اکسیژنی و احتراق MILD در یک کوره آزمایشگاهی همراه با جت‌های موازی به صورت عددی مورد مطالعه قرار گرفته است. در این سیستم نوین، به کمک رژیم MILD، علاوه بر رفع برخی مشکلات احتراق اکسیژنی، NO_x از ترکیب گازهای خروجی حذف شده و محصولات احتراق عمدتاً متشکل از H_2O و CO_2 هستند. در این پژوهش، میدان احتراقی به کمک دو ابزار محاسبات عددی و تحلیل WSR بررسی شده است. در تحلیل عددی سه بعدی، از روش RANS و مدل $k-\epsilon$ و مدل EDC در شبیه سازی تقابل آشفتنی جریان و شیمی احتراق استفاده شده است. تاثیر پیش گرم سازی و رقیق سازی به کمک CO_2 بر میدان احتراق و ترکیب گازهای خروجی بررسی شد. با افزایش دمای پیش گرم، تکانه جت افزایش یافته و در نتیجه آن بهبود یکنواختی توزیع دما در کنار افزایش انتشار CO مشاهده شد. همچنین، افزایش رقیق سازی، به کمک CO_2 در شرایط ثابت ورودی، دمای بیشینه را کاهش می دهد. بررسی تاثیر شیمیایی حضور CO_2 نشان دهنده تقویت مسیر تشکیل CO از طریق رادیکال CH_3O نسبت به مسیر اصلی از طریق فرمالدهید است. با افزایش حضور CO_2 در مخلوط، مسیر تولید CO از سمت اتان ضعیف تر و نقش رادیکال متیلن $CH_2(s)$ قوی تر می شود.

کلیدواژگان: احتراق اکسیژنی، احتراق MILD، رقیق سازی با CO_2 ، تحلیل عددی

مقدمه

پیش بینی می شود سوخت های هیدروکربنی، تا زمان قابل توجهی در آینده، همچنان به عنوان اصلی ترین منبع انرژی بشر باقی بمانند. از این رو، با توجه به پیدایش پدیده هایی همچون گرمایش زمین، توسعه سیستم های احتراقی با راندمان بالا و سازگار با استانداردهای زیست محیطی از اهداف اصلی جامعه احتراق است.

نیاز به دماهای بالاتر در صنایعی همچون ذوب فولاد موجب شده است که تحقیقات در زمینه احتراق اکسیژنی گسترش یابد. این امر در احتراق معمولی با استفاده از هوا میسر نمی شود. علاوه بر این نیاز، با پیشرفت فناوری جمع آوری و ذخیره سازی دی اکسید کربن^۱، تکنولوژی احتراقی اکسیژنی^۲، که در گذشته تنها برای رسیدن به احتراق با دمای بالا از آن استفاده می شد، در سال های اخیر توجه های بسیاری را به خود معطوف ساخته است، چراکه در این رژیم، با حذف کامل گاز نیتروژن از اکسیدکننده (هوا)، گازهای حاصل از احتراق عمدتاً از CO_2 و H_2O تشکیل می شوند. با این حال، کنترل پذیری پایین تر و

1. CCS (Carbon Capture and Sequestration)
2. Oxy-fuel combustion

مصرف بالای اکسیژن خالص و هزینه‌های آن، به‌علت نیاز به سیستم ASU^۱، از معایب این سیستم به‌شمار می‌رود [۲،۱]. از دیگر چالش‌های پیش رو در احتراق اکسیژنی می‌توان به مسئله ناپایداری احتراق و شیوه افزایش بازده حرارتی سیستم [۳] و تولید اکسیدهای نیتروژن^۲ به‌علت نشت هوا به داخل محفظه در مقیاس‌های صنعتی [۴] اشاره کرد. در واقع با استفاده از اکسیژن خالص به‌جای هوا، دمای شعله و شدت احتراق در مقایسه با احتراق معمولی به‌طور محسوسی افزایش می‌یابد که موجب افزایش چشمگیر انتشار آلاینده‌های NO_x می‌شود. به‌عبارتی دستیابی هم‌زمان به بازده بالا و آلاینده‌های اندک در احتراق اکسیژنی مشکل است. از این رو، در سال‌های اخیر، پیاده‌سازی احتراق اکسیژنی تحت رژیم MILD^۳ (احتراق تحت رقیق‌سازی بالا) می‌تواند یکی از گزینه‌های مناسب در حل این مسئله باشد.

رژیم احتراق MILD در دو دهه گذشته از یک‌سو به‌عنوان پاسخی به حل معضل آلاینده‌های احتراق و از سوی دیگر به‌عنوان سیستمی نوین در بالابردن راندمان سیستم‌های حرارتی و احتراقی مورد توجه محققان قرار گرفته است. در خصوص مشخصات و ویژگی‌های این رژیم احتراقی مقالات و گزارشات بسیاری منتشر شده است. احتراق MILD در واقع احتراق مخلوط سوخت و اکسیدکننده رقیق‌سازی و پیش‌گرم‌شده است. پارامتر کلیدی در دستیابی به شرایط رژیم احتراقی MILD پیش‌گرم‌کردن مواد واکنش‌دهنده تا دمای بالاتر از دمای خوداشتعالی سوخت (غالباً به‌کمک محصولات احتراق با دمای بالا) است. همچنین، برای رسیدن به شرایط رژیم احتراق MILD پایدار، می‌توان از اختلاط و گردش سریع مخلوط گازهای احتراق داخل محفظه برای افزایش اختلاط مواد واکنش‌دهنده و افزایش دمای گازها تا دمایی بالاتر از دمای خوداشتعالی سوخت و نیز رقیق‌سازی اکسیژن مخلوط استفاده کرد [۵،۶]. این میزان افزایش دما نباید از دمای اولیه مخلوط (دمای پیش‌گرم) تجاوز کند. رژیم MILD، یک نوآوری پاک و بهینه در تکنولوژی احتراق محسوب می‌شود. انتشار بسیار پایین آلاینده NO_x و در عین حال افزایش راندمان سیستم، توزیع یکنواخت دما در محفظه، افزایش شار انتقال حرارت تشعشعی و شرایط عملیاتی پایدار از مزایای ارزشمند این فناوری محسوب می‌شود [۷،۸]. در ایران نیز این رژیم احتراقی در دانشگاه‌های علم و صنعت ایران [۹]، تربیت مدرس [۱۰،۱۱]، شهید بهشتی [۱۲]، رازی کرمانشاه [۱۳] و صنعتی امیرکبیر [۱۴] به‌صورت جداگانه با روش‌های عددی و تجربی مورد تحقیق و بررسی قرار گرفته است. به‌صورت تئوری، در صورتی که احتراق اکسیژنی تحت شرایط MILD (یعنی رقیق‌سازی اکسیدکننده و مخلوط گازهای احتراق و استفاده از تکنولوژی پیش‌گرم‌سازی) صورت پذیرد، راندمان حرارتی آن بهبود یافته و هم‌زمان محصولات احتراقی عاری از اکسیدهای نیتروژن، آماده برای فناوری جمع‌آوری و ذخیره‌سازی دی‌اکسیدکربن خواهیم داشت [۴]. به‌عبارت دیگر، ایده اصلی این پژوهش استفاده از اکسیژن پیش‌گرم و یا O₂/CO₂ پیش‌گرم به‌عنوان اکسیدکننده به‌جای هوای پیش‌گرم است که از آن به‌عنوان احتراق oxy-MILD یاد می‌شود. بخار آب موجود در محصولات احتراق پس از گذر از فرایند میعان تفکیک شده و جریان گاز خروجی تقریباً تنها متشکل از CO₂ خواهد بود. جریان CO₂ خالص خروجی، علاوه‌بر تسهیل فرایند CCS، دارای کاربرد در صنایعی همچون بازیابی پیشرفته نفت (EOR)^۴ و تولید متان از ذغال‌سنگ (CBM)^۵ است [۱۵]. در oxy-MILD، انتظار می‌رود آلاینده‌های NO_x به صفر برسد (در صورت عدم نفوذ هوا به محفظه و استفاده از سوخت‌های عاری از نیتروژن). البته، یکی از معایب سیستم‌های oxy-MILD نیاز به سیستم جداساز هواست که به‌لحاظ اقتصادی عملیاتی‌شدن آن را با مشکل مواجه می‌کند. اما، با حذف سیستم‌های گوگردزداء^۶ و نیتروژن‌زدا^۷، به‌علت نبود اکسیدهای نیتروژن و گوگرد در خروجی، از پیچیدگی و هزینه‌های سیستم‌های احتراقی و نیروگاهی کاسته می‌شود. با این تفسیرها بررسی توجیه اقتصادی oxy-MILD نیازمند تحقیقی جامع در مقیاس صنعتی است.

1. Air Separation Unit
2. NO_x (Nitrogen Oxides)
3. MILD (Moderate or Intense Low-oxygen Dilution)
4. Enhanced Oil Recovery
5. Coal Bed Methane production
6. Desulfurization
7. Denitrification

با وجود آنکه حجم خوبی از تحقیق بر روی هر دو سیستم MILD و احتراق اکسیژنی به صورت جداگانه صورت گرفته است، اطلاعات کاملی از ترکیب این دو سیستم در دسترس نیست و این ایده موضوع تحقیق معدودی از محققین بوده است. طی پروژه‌ای، تیم IFRF^۱ [۱۶] اقدام به آزمایش احتراق متان-اکسیژن تحت شرایط MILD کرد. ایشان به بررسی مشخصه‌های مشعل پرداختند و با مدل‌سازی عددی میدان احتراق به کمک مدل EDC^۲ و مکانیزم واکنش GRI.3.0، به خوبی توانستند نتایج تجربی آزمایش‌های خود را شبیه‌سازی کنند. کریشنامورتی و همکاران [۱۷] به مقایسه احتراق اکسیژنی MILD و احتراق اکسیژنی کلاسیک تحت شرایط یکسان با سوخت پروپان پرداختند. آن‌ها دریافتند رژیم MILD با تزریق نامتقارن اکسیژن با سرعت بسیار بالا (نزدیک صوت) قابل دستیابی است. همچنین، دریافتند تولید دوده^۳ در احتراق اکسیژنی کلاسیک بالا و در احتراق oxy-MILD ناچیز است. شیله و همکاران [۱۸] استفاده از تکنولوژی oxy-MILD را در کوره‌های صنعتی فولاد مطالعه کردند و کاهش مصرف سوخت و آلاینده‌های CO₂ و NO_x را گزارش کردند. استادلر و همکاران [۱۹] موفق به تولید و توسعه سیستم تزریق سوخت سرعت‌بالا با ظرفیت ۱۰۰ کیلووات در تکنولوژی احتراق oxy-MILD شدند. مشعل آزمایشگاهی آن‌ها موفق شد به رژیم پایدار oxy-MILD با دو جریان معمولی و جریان چرخشی دست یابد. خلیل و همکاران [۲۰] به مطالعه تجربی مشعل متان-اکسیژن در شرایط MILD در جریان چرخشی پرداختند. آن‌ها نوسان‌های شعله را برای درصدهای مختلفی از رقیق‌سازی به کمک CO₂ اندازه‌گیری کرده و پایداری شعله را با افزایش رقیق‌سازی از گذر از یک حدنصاب گزارش کردند. مردانی و همکاران [۲۱] به بررسی اهمیت اثر پخش مولکولی^۴ در شعله MILD با اکسیدکننده به صورت ترکیبی از اکسیژن، CO₂ و N₂ پرداختند و نتیجه گرفتند که تاثیر این پدیده با کاهش رینولدز جریان اکسیدکننده یا غلظت اکسیژن افزایش می‌یابد. مردانی و فضل‌الهی [۲۲] به بررسی ساختار شعله و برخی مشخصه‌های احتراق O₂/CO₂ با سوخت متان-هیدروژن پرداختند. آن‌ها با استفاده از روش‌های عددی و مفهوم راکتور اختلاط کامل (WSR)^۵ به صورت دو بعدی احتراق مشعل JHC^۶ را با ترکیب‌های متفاوتی از اکسیدکننده شامل CO₂، H₂O، N₂ و O₂ مطالعه کردند. نتایج پژوهش آن‌ها حاکی از وجود ناحیه واکنش وسیع‌تر و توزیع دمایی یکنواخت‌تر در احتراق oxy-MILD نسبت به احتراق air-MILD بود. همین‌طور در شرایط یکسان ورودی، برای احتراق oxy-MILD غلظت گونه‌های OH و HCO کمتر و غلظت گونه‌های CHO₂، H₂O و CO در مقایسه با احتراق air-MILD بیشتر است. آن‌ها به تاثیر حضور هیدروژن در ترکیب سوخت نیز اشاره کردند و نشان دادند افزایش غلظت H₂ در سوخت باعث کاهش پارامترهای کیفی احتراق همچون توزیع یکنواخت دما می‌شود. سابی و همکاران [۲۳] رفتار دینامیکی رژیم اکسی-سوخت تحت شرایط MILD را با سوخت متان در راکتور اختلاط کامل بررسی کردند. آن‌ها اثر حضور CO₂ بر مسیر اکسایش را مورد مطالعه قرار دادند و رفتار دینامیکی پیچیده‌ای را در ارتباط با نوسان‌های دما گزارش کردند.

در سال ۲۰۱۳، لی و همکاران [۲۴] به مطالعه تجربی احتراق اکسیژنی تحت شرایط MILD در یک محفظه آزمایشگاهی با جت‌های موازی پرداختند. طرحواره این مشعل در شکل ۱ نشان داده شده است. آن‌ها آزمایش‌های خود را با سه سوخت گاز طبیعی (NG)، LPG و اتیلن در مشعلی با توان ۱۳ kW انجام دادند و به بررسی اثرات محدوده نسبت استیوکیومتری^۷، میزان CO₂ خارجی به‌کاربرده‌شده در رقیق‌سازی، ابعاد نازل سوخت و اکسیدکننده بر آغاز و یا عدم وقوع احتراق MILD و آلاینده‌های NO_x پرداختند. همچنین، اثر دمایی محفظه بر میزان NO_x منتشرشده از سه سوخت مذکور نیز مورد بررسی قرار گرفت. داده‌های تجربی به‌دست‌آمده نشان داد با افزایش رقیق‌سازی CO₂ در احتراق اکسیژنی، می‌توان به رژیم MILD دست یافت و افزایش رقیق‌سازی تحت رژیم MILD، دمای محفظه و انتشار NO_x را کاهش می‌دهد. نتایج پژوهش آن‌ها نشان داد که

1. Internation Flame Research Foundation
2. Eddy-Dissipation Concept
3. Soot
4. Molecular diffusion
5. Well Stirred Reactor
6. Jet-in-hot-Coflow
7. Stoichiometric ratio

تکانه جت سوخت مهم‌ترین پارامتر در شکل‌گیری شعله MILD است. در این تحقیق، استفاده از نازل کوچک‌تر و رقیق‌سازی هم‌زمان با CO_2 تکانه جت سوخت را افزایش داده و شکل‌گیری شعله MILD را تسریع می‌بخشد. افزایش تکانه سوخت منجر به کاهش اکسیژن در خروجی، افزایش CO_2 در ورودی و کاهش NO_x و نیز کاهش دمای محفظه می‌شود [۲۴]. آن‌ها همچنین دریافتند با افزایش نسبت هم‌ارزی Φ ، شعله نامرئی‌تر می‌شود و نتیجه‌گیری کردند که برای مقدار ثابتی از کسر جرمی CO_2 مخلوط، یک Φ بحرانی وجود دارد که به‌ازای مقادیر Φ کمتر از Φ بحرانی، رژیم MILD آغاز نخواهد شد. نسبت استیوکیومتری به‌صورت رابطه (۱) تعریف می‌شود.

$$\Phi = \frac{(O/F)_{stoic}}{(O/F)} \quad (1)$$

که در آن O/F نسبت اکسیدکننده به سوخت و زیروند stoic بیانگر شرایط استیوکیومتریک است. همچنین، لی و همکاران در تحقیق دیگری [۲۵] به بررسی احتراق oxy-MILD با سوخت پودر زغال‌سنگ و نفت سبک در کوره آزمایشگاهی با سه مشعل متفاوت پرداختند. آن‌ها نشان دادند که رژیم oxy-MILD بیشتر از air-MILD تولیدات NO ناشی از سوخت را کنترل می‌کند.

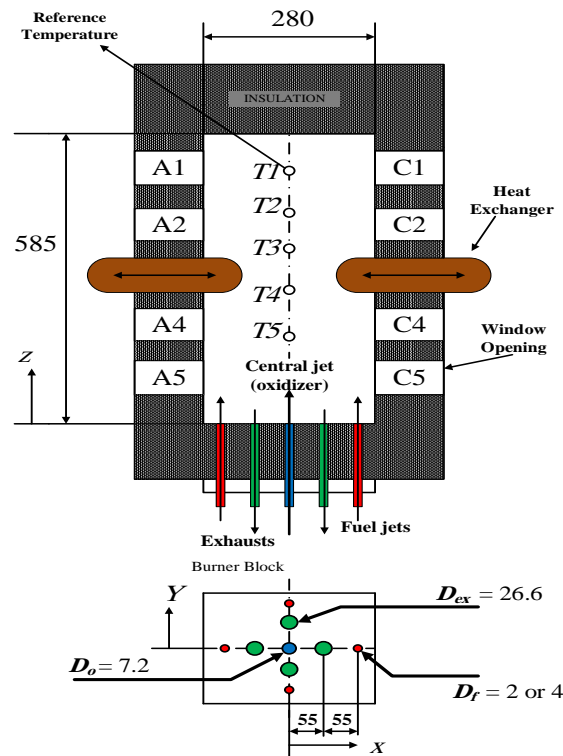


Figure 1- Schematic view of MILD Combustion Furnace (MCF) [24] (mm in unit)
 شکل ۱- طرحواره محفظه احتراق (MCF) [۲۴] (واحدها به میلی‌متر است).

در یک مطالعه دیگر، استفاده از پودر زغال‌سنگ در رژیم oxy-MILD در مقیاس صنعتی توسط پرونه و همکاران [۲۶] به‌صورت عددی بررسی شد. نتایج شبیه‌سازی ایشان پتانسیل بالای این تکنولوژی در مقیاس صنعتی را نشان داد و حاکی از یکنواختی دما، توزیع گونه‌ها و شار حرارتی از دیواره‌ها بود. همچنین، خلوص ۹۵ درصد CO_2 و NO_x ناچیز ناشی از ترکیب سوخت را گزارش کردند. به‌طور خلاصه امکان‌سنجی و تعیین شرایط اولیه ترمودینامیکی و شیمیایی سوخت و اکسیدکننده در دستیابی به رژیم oxy-MILD، ورود به این رژیم و بررسی ساختار شعله در محفظه‌های باز از مهم‌ترین مطالعات صورت‌گرفته بر روی این رژیم احتراقی جدید بوده است. اما، با این حال، فارغ از بحث تشکیل و یا عدم تشکیل شعله MILD، تفاوت‌های

عملکردی این رژیم در گستره‌ای از شرایط ورودی مختلف و تاثیر میزان رقیق‌سازی اکسیدکننده و دمای پیش‌گرم بر ترکیب گازهای خروجی تحت شرایط MILD تاکنون مورد بررسی قرار نگرفته است. از این رو، هدف از این تحقیق بررسی میدان احتراق در رژیم احتراق اکسیژنی تحت شرایط MILD (سیستم احتراقی $NG-O_2/CO_2$) در یک محفظه بسته با شرایط یکسان توان حرارتی^۱، مطالعه تاثیر پارامترهایی همچون دمای پیش‌گرم و میزان رقیق‌سازی اکسیدکننده (درصد CO_2 ورودی همراه با اکسیژن خالص در جریان اکسیدکننده) بر میدان احتراق و ترکیب گازهای خروجی است. همچنین، در این پژوهش، علاوه بر مدل‌سازی عددی، با کمک راکتور اختلاط کامل تحلیلی صفر بعدی از سیستم صورت گرفته است و اثر پارامترهایی مانند میزان رقیق‌سازی و دمای پیش‌گرم از منظر ترموشیمیایی بررسی و نتایج آن با نتایج حل عددی مقایسه شده است.

مدل فیزیکی

تحقیق جاری بر روی محفظه احتراق آزمایشگاهی MCF^۲ صورت گرفته است که طرحواره آن در شکل ۱ نشان داده شده است. جزئیات مربوط به آن در مرجع [۲۷] و [۲۸] ارائه شده است و در این بخش به شرح آن به اختصار پرداخته خواهد شد. محفظه احتراق دارای مشعلی با مقطع مربع و ابعاد $۲۸۰ \times ۲۸۰ \times ۵۸۵$ میلی‌متر است که تمامی نازل‌های جت مرکزی اکسیدکننده، سوخت و خروجی در یک سمت کوره و بر روی یک صفحه قرار دارند. نازل جت اکسیدکننده در مرکز مقطع قرار دارد که توسط چهار جت سوخت و چهار نازل خروجی به صورت متقارن در بر گرفته شده است. محفظه احتراق با ۴ لایه سرامیکی با ضخامت ۳۸ میلی‌متر عایق‌بندی شده است که اجازه می‌دهد تنها ۲۰ درصد از کل حرارت ورودی به سیستم از دیواره به محیط بیرون انتقال یابد. این امر به برقراری و پایداری رژیم MILD کمک موثری می‌کند. همان‌طور که در شکل ۱ دیده می‌شود این محفظه دارای ۵ دیواره شیشه‌ای در دو وجه روبه‌روی هم است که با فواصل مساوی به صورت عمودی قرار گرفته‌اند و در شکل ۱ از A1 تا A5 و از C1 تا C5 نشان داده شده‌اند. این دیواره‌های شیشه‌ای اجازه نصب تجهیزات بصری و اندازه‌گیری در دیواره‌های محفظه را می‌دهد. همچنین، دو مجرای U شکل با سطح تماس متغیر به منظور خنک‌کاری داخل کوره و تنظیم میزان انتقال حرارت از محفظه با قابلیت ورود به محفظه از هر یک از دیواره‌های شیشه‌ای تعبیه شده است. هنگامی که از NG به عنوان سوخت استفاده شود، هوا و یا مخلوط O_2/CO_2 به عنوان اکسیدکننده وارد محفظه می‌شود (CO_2 قبل از پاشش به داخل محفظه با اکسیژن مخلوط می‌شود).

شبیه‌سازی عددی

مدل‌سازی در این پژوهش شامل دو بخش است. در بخش اول مدل‌سازی جریان درون محفظه به کمک شبیه‌سازی عددی صورت گرفته است و در بخش دوم تحلیل شیمیایی احتراق گاز طبیعی در یک راکتور اختلاط کامل ارائه شده است. مطالعه عددی به کمک نرم‌افزار فلونت^۳ انجام شده است. همان‌گونه که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، هندسه محفظه احتراق متقارن است. از این رو، شبکه محاسباتی بی‌سازمان در بستر نرم‌افزار گمبیت^۴ با حدود نیم‌میلیون سلول بر روی نیمی از محفظه که در مقطع عرضی برش خورده است صورت گرفته است. جهات و شبکه تولیدشده از سه نما در شکل ۲ نشان داده شده است. همچنین، استقلال نتایج حل عددی از شبکه محاسباتی به کمک تکرار محاسبات با شبکه‌های یک‌میلیون سلولی و سیصد هزار سلولی تایید شد. مقایسه بین نتایج عددی و تجربی (براساس اندازه‌گیری سرعت جریان در مقاطع مختلف از راستای محوری محفظه) نشان داد که استفاده از شبکه محاسباتی با یک‌میلیون سلول صرفاً موجب افزایش دقت محاسبات به میزان بسیار اندک می‌شود (شکل ۳ و ۴). لذا، برای کاهش هزینه و زمان محاسبات، شبکه محاسباتی با تعداد نیم‌میلیون سلول

1. Firing rate
2. MILD Combustion Furnace
3. Fluent
4. GAMBIT

برای ادامه شبیه سازی‌های عددی انتخاب شد. در این پژوهش، فرض گاز ایدئال برای گاز طبیعی (با ترکیب جرمی ۱۵ درصد اتان و ۸۵ درصد متان)، هوا، اکسیژن خالص و گازهای حاصل از احتراق اعمال شده است. گرمای ویژه گازهای ورودی به‌عنوان تابعی از دما در محاسبات تعریف می‌شوند (چندجمله‌ای تکه‌ای)^[۲۹]. همچنین، در شکل ۲ چپ شرایط مرزی میدان محاسباتی نشان داده شده است. ورودی‌ها، خروجی‌ها و دیواره به‌ترتیب به‌عنوان مرز ورودی جرمی، مرز با شرایط مرزی فشار سکون ثابت (۱ اتمسفر) و مرز دمای ثابت در نظر گرفته می‌شوند.

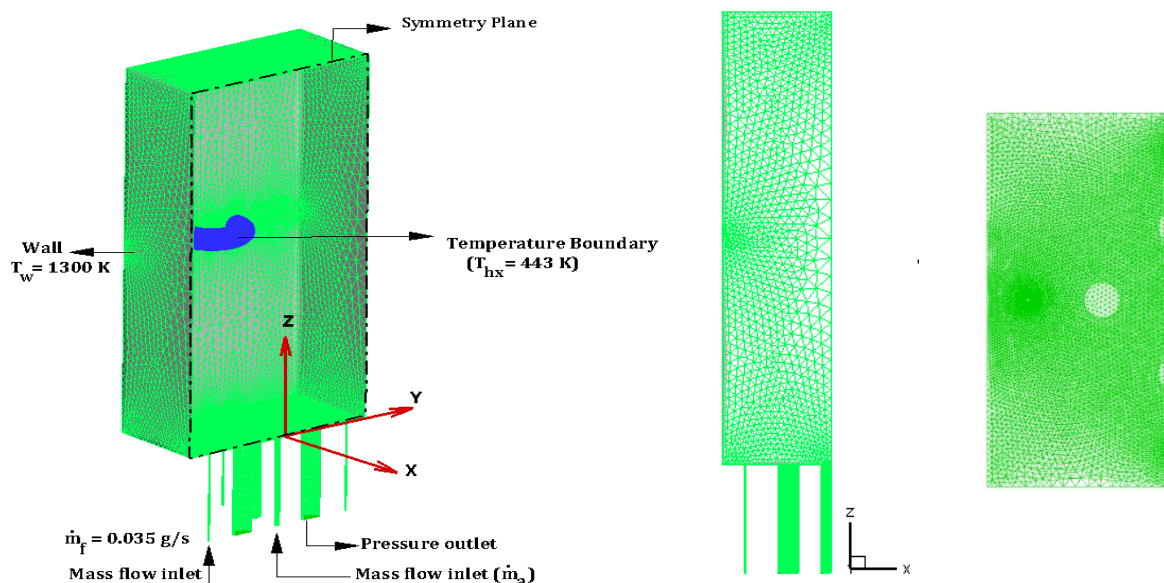


Figure 2- Schematic view of (left) computational domain and the boundary condition (center) side view mesh (right) bottom view mesh
 شکل ۲- نمای طرحواره از هندسه محاسباتی و شرایط مرزی (چپ) نمای جانبی از شبکه (مرکز) و نمای شبکه از پایین (راست)

معادلات حاکم در شرایط پایا برای جریان تراکم‌ناپذیر با مرتبه دو گسسته‌سازی شده و با روش غیرمستقیم و حجم محدود حل شدند. به‌منظور مدل‌سازی جریان آشفته داخل محفظه، از روش RANS^۲ و مدل $k-\epsilon$ RNG^۳ و تابع دیواره استاندارد استفاده شده است. طبق نتایج مراجع [۳۱، ۳۰]، این مدل قادر به رفع کاستی‌های مدل $k-\epsilon$ استاندارد همچون حل جریان‌های پیچشی^۴ و گردشی^۵ است و با توجه به فیزیک جریان و گردش شدید گازهای حاصل از احتراق در محفظه، در تمامی محاسبات به‌کار گرفته شده است. همچنین، به‌منظور مدل‌سازی میدان احتراق داخل محفظه و در نظر گرفتن برهمکنش جریان‌های آشفته و شیمی واکنش احتراق، از مدل EDC^۶، که تلفیقی از مدل ED^۶ و مدل نرخ محدود آرنیوس^۷ است، استفاده شده است. موفقیت مدل EDC در شبیه‌سازی رژیم احتراق MILD در پژوهش‌های بسیاری نشان داده شده است [۳۱، ۳۲-۳۳]. با این حال، طبق نتایج تحقیق مرجع [۳۱]، برای عدد رینولدز جریان آشفته (Re_t) کمتر از ۶۵ این مدل در پیش‌بینی زمان اشتعال با مشکل مواجه می‌شود و لازم است تا ضرایب استاندارد موجود در معادلات این مدل تصحیح شوند. عدد رینولدز آشفته در تحقیقات مشابه بر روی محفظه آزمایشگاهی شکل ۱ با شرایط مشابه بزرگ‌تر از ۶۵ بوده که امکان استفاده از مدل EDC با ضرایب استاندارد را فراهم می‌کند.

1. Piecewise polynomial
2. Reynold's Averaged Navier-Stokes
3. Re-Normalized Group
4. Swirl flows
5. Recirculating flows
6. Eddy Dissipation
7. Arrhenius Finite Rate

مکانیزم‌های واکنش DRM-22 و DRM-19 فرم کاهش‌یافته مکانیزم کامل GRI.3.0 هستند [۳۴]. این مکانیزم در بازه دمایی تا ۲۵۰۰ کلوین، بازه فشاری ۱۰ تور تا ۱۰ اتمسفر و برای نسبت هم‌ارزی ۰/۱ تا ۵ نتایج قابل‌قبولی ارائه کرده است [۳۴]. پرنته و همکاران [۳۲] تطبیق قابل‌قبولی بین DRM-19 و GRI.3.0 در مدل‌سازی احتراق MILD گزارش کردند. در تحلیل مرجع [۳۴] عملکرد بهتری از DRM-22 نسبت به DRM-19 در تخمین احتراق با غلظت اکسیژن پایین و دمای پیش‌گرم بالا نشان داده شده است. از این رو، در بخش تحلیل عددی در این تحقیق، مکانیزم DRM-22 که حاوی ۲۴ گونه و ۱۰۴ واکنش است به‌کار گرفته شده است.

در جدول ۱ جزئیات شرایط عملکردی محفظه که در پژوهش حاضر مورد مطالعه قرار گرفته، ارائه شده است. زگو و همکاران [۲۷،۲۸] از نازل اکسیدکننده با مقطع $D_n=26/6$ mm در تحلیل تجربی احتراق گاز طبیعی-هوا با نرخ حرارتی $P=15$ kW کیلووات، و قطر نازل سوخت $D_f=2$ mm استفاده کردند، درحالی‌که لی و همکاران [۲۴] از نازلی با قطر $D_n=7/2$ mm در شرایط $P=13$ kW و $D_f=2$ mm برای رسیدن به شرایط احتراق MILD استفاده کردند. طبق مشاهدات لی و همکاران، قطر نازل اکسیدکننده پایداری رژیم MILD را تحت تاثیر قرار می‌دهد. آن‌ها نشان دادند که برای سیستم کنونی با جت‌های موازی، احتراق اکسیژنی MILD ($X_{O_2}=10\%$) در شرایط $P=13$ kW، $\Phi=1$ و $D_n=7/2$ mm قابل‌دستیابی است، درحالی‌که در همین شرایط با افزایش قطر نازل به $26/6$ mm رژیم احتراقی MILD حاصل نمی‌شود. با وجود این، در صورت استفاده از هوا به‌جای اکسیژن خالص و با به‌کارگیری نازل اکسیدکننده به قطر $26/6$ میلی‌متر، احتراق air-MILD برقرار می‌شود. با کاهش مقطع جت اکسیدکننده، تکانه جت اکسیدکننده افزایش یافته و به‌تبع آن گردش گازهای داخل محفظه و در نتیجه فرایند رقیق‌سازی داخلی بهبود می‌یابد. زمانی که درصد اکسیژن اولیه ورودی افزایش می‌یابد، برای دستیابی به میزان رقیق‌سازی مورد نظر و حصول رژیم MILD، به سطح بالاتری از تکانه جت و شدت گردش گازهای حاصل از احتراق در درون محفظه نیاز است. در شرایط عملکردی ۲ تا ۱۱ از جدول ۱ توان حرارتی ثابت معادل $P=13$ kW است. بدین ترتیب جریان جرمی سوخت در حدود $\dot{m}_f = 0/28$ g/s در دمای اتاق وارد محفظه می‌شود که معادل $0/07$ g/s برای هر نازل جت سوخت است [۲۴]. از آنجایی‌که شبیه‌سازی بر روی نیمی از محفظه انجام شده است، دبی جرمی سوخت در دو نازل با مساحت نصف‌شده برابر $0/035$ g/s و در یک نازل کامل برابر $0/07$ g/s است (شکل ۲ چپ). دبی جرمی اکسیدکننده نیز با تغییر درصد CO_2 و Φ جداگانه تنظیم می‌شود. در اندازه‌گیری‌های انجام‌شده توسط لی و همکاران [۲۴] دماهای ثابت ۱۳۰۰ و ۴۴۳ کلوین به‌ترتیب برای مرز دیواره و مبدل حرارتی در نظر گرفته شده است تا اثرات انتقال حرارت در محاسبات لحاظ شود. در تحقیق لی و همکاران [۲۴] تاثیر عواملی همچون نوع سوخت، قطر جت سوخت و هوا، نسبت هم‌ارزی و میزان رقیق‌سازی بر ناحیه تشکیل شعله oxy-MILD بدون استفاده از دمای پیش‌گرم بررسی شده است. از طرفی، به‌علت جزئی‌بودن مقادیر CO در خروجی، لی مقادیری از CO تحت این رژیم را گزارش نکرده است. از این رو، در تحقیق حاضر، نحوه تاثیر حضور CO_2 بر میدان دما و مکانیزم تولید CO مطالعه شده است. همچنین، تاثیر دمای پیش‌گرم بر میدان جریان و دما و نیز تولیدات CO و CO_2 بررسی شده است.

جدول ۱- شرایط عملکردی مختلف که در مطالعه حاضر بررسی شده‌اند

Table 1- Different operating conditions of the combustor studied in the current research

Case	Oxidizer Inlet Temperature (K)	Oxidizer Composition	CO2 Volumetric Fraction in Oxidizer X_{CO_2} (%)	Equivalence Ratio (Φ)	Oxidizer Nozzle Diameter (mm)	Firing Rate (kW)
1	723	Air	0	0.8	26.6	15
2	298	CO ₂ /O ₂	0-63	1	7.2	13
3	298	CO ₂ /O ₂	0	1	7.2	13
4	298	CO ₂ /O ₂	15	1	7.2	13
5	298	CO ₂ /O ₂	30	1	7.2	13
6	298	CO ₂ /O ₂	50	1	7.2	13
7	423	CO ₂ /O ₂	30	1	7.2	13
8	723	CO ₂ /O ₂	30	1	7.2	13
9	298	CO ₂ /O ₂	30	0.9	7.2	13
10	423	CO ₂ /O ₂	30	0.9	7.2	13
11	723	CO ₂ /O ₂	30	0.9	7.2	13

مهم‌ترین رکن در دستیابی به احتراق MILD، گردش گازهای حاصل از احتراق و گردش و جابه‌جایی حرارت در محفظه است. گردش حرارت حاصل از گازهای محترقه باعث بالارفتن دمای واکنش‌دهنده‌ها می‌شود و در عین حال گردش جرم گازهای حاصل از احتراق موجب رقیق‌سازی اکسیژن ورودی و پایین‌رفتن دما در ناحیه واکنش می‌شود. بدین ترتیب، علاوه بر رقیق‌سازی و پیش‌گرمایش خارجی، با کمک هندسه جریان بازگشتی^۱ و پیش‌گرمایش داخلی واکنش‌دهنده‌ها می‌توان به شرایط مورد نیاز در احتراق MILD دست یافت. گردش شدید گازهای درون محفظه باعث تسریع و بهبود فرایند انتقال حرارت جابجایی می‌شود [۲۴]. در احتراق MILD در محفظه تحقیق جاری، با توجه به گردش محصولات احتراق، اختلاط واکنش‌دهنده‌ها و محصولات احتراق تقریباً به صورت کامل رخ می‌دهد که این امر، استفاده از مدل راکتور اختلاط کامل را ممکن می‌سازد. با در نظر گرفتن هزینه بالای محاسبات در شبیه‌سازی‌های عددی، استفاده از مدل راکتور اختلاط کامل در بررسی محفظه به لحاظ ترموشیمیایی، می‌تواند مفید باشد.

ذکر این نکته لازم است که در شبیه‌سازی انتقال حرارت تابشی، از مدل (DO)^۲ با مدل WSGGM^۳ برای حالت اکسیژن خالص استفاده شده و گسست زاویه‌ای ۲×۲ و پیکسل ۱×۱ در نظر گرفته شده است. طبق تحقیق انجام‌شده توسط ابراهیمی فردویی [۳۵]، در مدل‌سازی احتراق گاز طبیعی-اکسیژن، مدل DO از مدل P1 عملکرد بهتری داشته و در این تحقیق نیز استفاده شده است. در شرایطی که $X_{O_2} < 100$ (شرایط عملکردی ۴ تا ۱۱) مخلوط اکسیدکننده به صورت گاز غیرخاکستری در نظر گرفته شده است، چراکه مخلوط گازی، که غالباً از H_2O و CO_2 تشکیل شده است، را نمی‌توان به صورت گاز خاکستری در نظر گرفت. مشابه مرجع [۳۶]، در جدول ۲ ضرایب جذب ثابت برای ۶ طول موج متفاوت در سه نسبت مختلف از X_{O_2}/X_{CO_2} در نظر گرفته شده است.

جدول ۲- ضرایب جذب برای مقادیر مختلف از نسبت‌های حجمی O_2/CO_2

Table 2- Absorption coefficients for different O_2/CO_2 volumetric ratios

Wavelength intervals (μm)	$\frac{X_{O_2}}{X_{CO_2}} = 50\%/50\%$	70%/30%	85%/15%
0-2.5	0	0	0
2.5-3.0	0.43	0.26	0.13
3-4.0	0	0	0
4-5.0	0.44	0.27	0.13
5-9.0	0	0	0
9.0-20	0.41	0.24	0.12

بحث و نتایج

قبل از ارائه نتایج مدل‌سازی‌های صورت‌گرفته در مطالعه حاضر، برای تایید صحت نتایج مدل عددی انتخاب‌شده، ابتدا مقایسه نتایج تجربی آزمایش‌های زگو و همکاران [۲۸] (شرایط عملکردی ۱ از جدول ۱) و نتایج شبیه‌سازی عددی انجام شده است.

صحت‌سنجی مدل عددی

پروفیل سرعت

شکل ۳ پروفیل عرضی سرعت محوری برای شرایط عملکردی ۱ (قطر نازل سوخت ۲ میلی‌متر، قطر نازل اکسیدکننده ۲۶/۶ میلی‌متر، دمای پیش‌گرم ۷۲۳ کلوین و نسبت هم‌ارزی ۰/۸) در راستای ارتفاع محفظه (محور Z) در سه خط متفاوت را نشان می‌دهد. نتایج حاصل از شبیه‌سازی در تحقیق حاضر و اندازه‌گیری‌های LDA^۴ توسط زگو مقایسه شده است [۲۸]. پروفیل

1. Reverse flow
2. Discrete Ordinate
3. Weighted Sum of Grey Gas Model
4. Laser Doppler Anemometry

سرعت در نزدیکی صفحه خروجی جت در ارتفاع ۶۵/۵ میلی‌متر به‌وضوح اثر حضور جت هوای مرکزی و جت‌های سوخت جانبی را نشان می‌دهد. به‌دلیل بالابودن تکانه جت، روش LDA دقت لازم برای اندازه‌گیری مؤلفه‌های عرضی سرعت (V_Y و V_X) را ندارد. لذا، فقط مؤلفه محوری سرعت (V_Z) برای مقایسه ارائه شده است [۲۸].

شکل ۳ چپ همچنین نشان می‌دهد که وجود فاصله بین جت هوا و سوخت موجب می‌شود که میزان اختلاط سوخت و هوا در فواصل نزدیک به نازل ورودی کاهش یابد. مقادیر اندازه‌گیری‌شده سرعت در آزمایش‌های تجربی، در مناطقی که در محدوده مسیر توسعه جت ورودی‌اند، بعضاً معادل صفر یا حتی منفی‌اند که نشان‌دهنده وجود جریان‌های برگشتی به‌سمت نازل خروجی است. باید در نظر داشت، همان‌گونه که در پژوهش زگو [۲۸] نشان داده شده است، پروفیل سرعت اندازه‌گیری‌شده در میدان جریان متقارن نیست. این مطلب در شکل ۳ نیز قابل مشاهده است. در مطالعه حاضر نیز، به‌دلیل نداشتن اطلاعاتی از پروفیل جریان‌های ورودی، مدل حاضر قادر نیست که عدم تقارن موجود در پروفیل سرعت را به‌طور دقیق نشان دهد و نتایج شبیه‌سازی صرفاً به‌طور کیفی با نتایج تجربی تطابق دارد.

در واقع، به‌دلیل تولید جریان‌های گردابه‌ای پیچیده در اثر تداخل جت‌های ورودی سوخت و جریان بازگشتی به‌سمت نازل خروجی در نواحی نزدیک به نازل خروجی، روش عددی به‌کاررفته قادر به محاسبه دقیق ساختارهای تولیدشده حاصل از این تداخل در این نواحی نیست. در نتیجه تفاوت‌هایی بین اندازه‌گیری‌های صورت‌گرفته و نتایج مدل عددی در پروفیل سرعت در نواحی نزدیک به ورودی جت سوخت به‌وجود آمده که البته در تحلیل عددی انجام‌شده توسط زگو نیز مشهود است [۲۸]. با این حال، سرعت جت هوا در این ارتفاع با دقت خوبی پیش‌بینی شده است. با گذر از این ناحیه، پیش‌بینی پروفیل مؤلفه محوری سرعت در $Z=176/5\text{mm}$ قوی‌تر می‌شود. شکل ۳ وسط و راست توزیع عرضی مؤلفه محوری سرعت را برای شرایط عملکردی ۱ از جدول ۱ در ارتفاع $Z=176/5\text{mm}$ و $X=0$ (راست) و ارتفاع $Z=176/5\text{mm}$ و $X=-10$ (وسط) نشان می‌دهد. به‌صورت کلی، می‌توان گفت پیش‌بینی مدل‌سازی عددی از میدان جریان به‌صورت کیفی از دقت مناسبی برخوردار است که به‌معنی عملکرد قابل‌قبول مدل عددی است. ذکر این نکته لازم است که به‌دلیل محدودیت‌های اندازه‌گیری در مطالعه زگو، اطلاعات و جزئیات کمی از میدان جریان در پژوهش [۲۸] ارائه شده است.

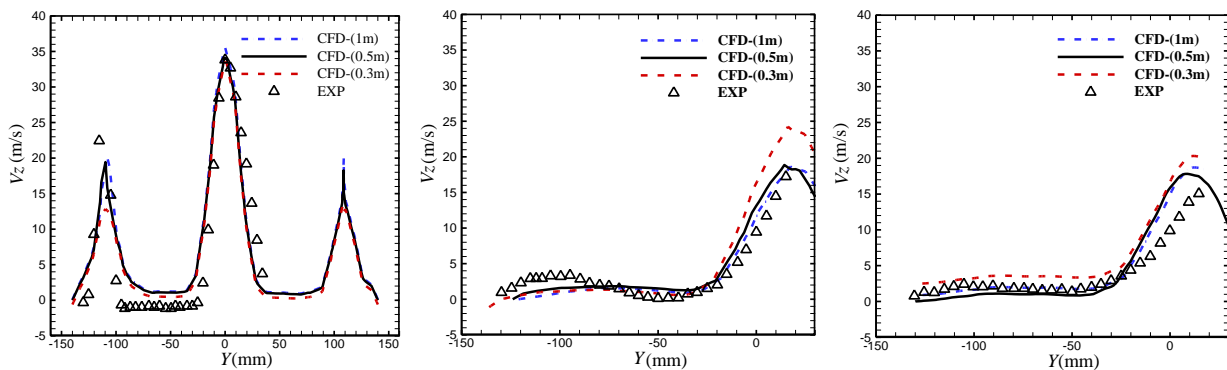


Figure 3- Predicted axial velocity profiles against measurements by [28] for case 1 in table 1 at $Z = 65.5\text{ mm}$, $X = 0$ (left), $Z = 176/5\text{ mm}$, $X = -10\text{ mm}$ (middle) and $Z = 176/5\text{ mm}$, $X = 0$ (right), with three different grid resolutions

شکل ۳- مقایسه سرعت محوری پیش‌بینی‌شده و اندازه‌گیری‌شده در شرایط عملکردی ۱ از جدول ۱ در فاصله $Z = 176/5\text{ mm}$, $X = 0$ (راست) و $Z = 176/5\text{ mm}$, $X = -10\text{ mm}$ (وسط) و $Z = 65/5\text{ mm}$, $X = 0$ (چپ) به کمک سه شبکه محاسباتی با تراکم متفاوت

دمای میانگین و ترکیب گاز خروجی

شکل ۴ نشان‌دهنده توزیع دمای عرضی در دو ارتفاع ۴۲/۵ و ۵۴۲/۵ میلی‌متر از محفظه در صفحه YZ برای شرایط عملکردی ۱ از جدول ۱ است. نتایج به‌دست‌آمده از محاسبات عددی و آزمایش‌های تجربی مقایسه شده است. وجود نوسان در پروفیل عرضی

دما در ارتفاعات کم و نواحی نزدیک به صفحه نازل جت‌های ورودی و خروجی ناشی از اختلاف زیاد بین دمای واکنش‌دهنده های ورودی و گازهای داغ خروجی حاصل از احتراق است. تطابق بین نتایج حاصل از شبیه‌سازی عددی و نتایج تجربی مناسب بوده و نشان‌دهنده دقت بالای تخمین میدان دما، حتی در نواحی نزدیک به صفحه نازل‌ها ورودی و خروجی، است.

همان‌گونه که در شکل ۴ راست دیده می‌شود، در قسمت‌های بالایی (ارتفاع ۵۴۲/۵ میلی‌متر) دمای میانگین به‌خوبی پیش‌بینی شده است و یکنواختی توزیع دما در این ناحیه با شرایط با احتراق MILD سازگار است. عدم وجود گرادیان شدید دما و نبود قله دمایی، که از ویژگی‌های اصلی احتراق MILD است، در این ناحیه کاملاً قابل مشاهده است. بنابراین، رژیم MILD برای شرایط عملکردی ۱ از جدول ۱ به‌صورت عددی به‌خوبی شبیه‌سازی شده است.

در جدول ۳ مقادیر محاسبه‌شده از CO_2 ، O_2 و هیدروکربن‌های نسوخته در خروجی با تصحیح برای ۳٪ درصد اکسیژن با اندازه‌گیری‌های تجربی در مرجع [۲۸] مقایسه شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، مدل عددی توانسته با تقریب خوبی ترکیب خروجی گاز را پیش‌بینی کند. با شرایط عملیاتی $\Phi = 0.8$ حضور ۴ درصد اکسیژن در خروجی مشاهده شده است.

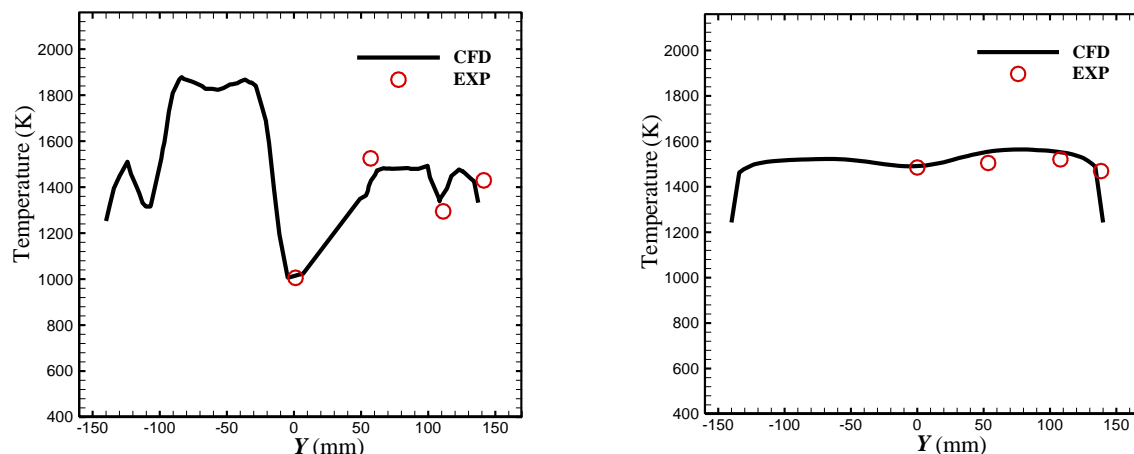


Figure 4- Temperature distribution for case 1 at $Z = 42.5 \text{ mm}$, $X = 0$ (left) and $Z = 542.5 \text{ mm}$, $X = 0$ (right)

شکل ۴- پروفیل توزیع دما در آزمایش ۱ در فاصله $X = 0$, $Z = 42/5 \text{ mm}$ (شکل چپ) و $X = 0$, $Z = 542/5 \text{ mm}$ (شکل راست)

جدول ۳- مقادیر اندازه‌گیری‌شده و محاسبه‌شده گونه‌ها برای ۳ درصد اکسیژن در خروجی برای شرایط عملکردی ۱ از جدول ۱

Table 3- Predicted and measured exhaust emissions at the outlet for case 1 in table 1			
@3% O_2	Unburned Hydrocarbons (ppm)	CO_2 [%]	O_2 [%]
Experiment	<100	9	4.2
CFD	0.9	9.2	4.3

تأثیر دمای پیش‌گرم بر میدان احتراقی و تولید CO

لی و همکاران [۲۴] توانستند بدون استفاده از پیش‌گرم‌سازی مخلوط اکسیدکننده و تنها با استفاده از تکانه بالای جریان و اختلاط فیزیکی و حرارتی مناسب به کمک هندسه، به رژیم oxy-MILD دست پیدا کنند. طبق نتایج آن‌ها، برای سوخت گاز طبیعی، این رژیم در محفظه موجود، در $\Phi = 1$ با اکسیژن خالص قابل دستیابی است و در صورت کمتر شدن نسبت هم‌ارزی، رژیم MILD تشکیل نخواهد شد. به همین ترتیب، در $\Phi = 0.9$ و رقیق‌سازی ۳۰ درصد شعله نامرئی و رژیم MILD به دست می‌آید. به عبارت دیگر، در احتراق oxy-MILD در صورت افزایش رقیق‌سازی، می‌توان با نسبت هم‌ارزی کمتری نیز به این رژیم احتراقی دست پیدا کرد. با فرض ثابت ماندن نرخ سوخت ورودی به سیستم، با کاهش نسبت هم‌ارزی سوخت و اکسیدکننده، می‌بایست نرخ دبی ورودی اکسیدکننده افزایش یابد.

به بیان دیگر، با افزایش رقیق‌سازی، به تکانه و سرعت بیشتری از جت اکسیدکننده برای گردش گازهای احتراق داخل محفظه نیاز است تا رژیم oxy-MILD برقرار شود. در تحقیق لی [۲۴] طی مراحل بررسی اثر رقیق‌سازی در این بخش، دمای ورودی مخلوط اکسیدکننده برابر ۲۹۸ کلوین (دمای اتاق) تنظیم‌شده و پیش‌گرم‌سازی صورت نگرفته است. در پژوهش حاضر، دو دمای پیش‌گرم ۴۲۳ و ۷۲۳ کلوین برای دو نسبت هم‌ارزی $\Phi = 1$ و $\Phi = 0.9$ در نظر گرفته شده است. شکل ۵ توزیع دما در صفحه YZ برای $\Phi = 1$ و $X_{CO_2} = 30\%$ را نشان می‌دهد (شرایط عملکردی ۵، ۷، ۸). همان‌طور که مشاهده می‌شود، با افزایش دمای پیش‌گرم، در نواحی نزدیک به صفحه ورودی نازل‌ها، در ارتفاع‌های مختلف از محفظه، گرادیان دما کاهش می‌یابد. به عبارت دیگر، با افزایش دمای پیش‌گرم، میدان احتراقی به‌طور محسوس یکنواخت‌تر و ناحیه واکنش وسیع‌تر می‌شود (شکل ۵). در واقع، پس از ورودی جریان سوخت و اکسیدکننده به محفظه و اختلاط آن‌ها، اگر دمای موضعی مخلوط گازی به بالاتر از نقطه خوداشتعالی سوخت برسد و نیز رقیق‌سازی به‌میزان کافی صورت گرفته باشد (کسر جرمی اکسیژن موضعی کاهش یابد)، انتظار تشکیل رژیم MILD می‌رود و در نتیجه آن توزیع دما در بخش بالایی محفظه یکنواخت خواهد شد. همچنین، باید توجه داشت که با افزایش دمای اولیه جت اکسیدکننده (و در عین حال ثابت‌نگه‌داشتن دمای اولیه جت سوخت) چگالی اکسیدکننده کمتر شده و باعث افزایش تکانه جت اکسیدکننده نسبت به تکانه جت سوخت می‌شود که به بزرگ‌تر شدن ناحیه احتراق می‌انجامد. شکل ۵ تغییرات دمای بیشینه محفظه را بر حسب دمای پیش‌گرم اکسیدکننده برای این شرایط (شرایط عملکردی ۵ و ۷-۱۰ از جدول ۱) نشان می‌دهد. مطابق شکل ۶، با افزایش دمای پیش‌گرم از ۲۹۸ به ۷۲۳ کلوین، دمای بیشینه محفظه تنها در حدود ۲۵ کلوین رشد داشته است. به عبارت دیگر، در احتراق oxy-MILD، پیش‌گرم‌سازی آنچنان باعث افزایش دمای بیشینه محفظه نشده است. همچنین، مقایسه اطلاعات مشابه برای $\Phi = 0.9$ نشان‌دهنده اختلاف اندک بین دمای بیشینه، میانگین و خروجی در حالت پیش‌گرم‌شده نسبت به حالت پیش‌گرم نشده است. این یافته به منزله آن است که در احتراق oxy-MILD، با فراهم‌بودن شرایط پیش‌گرم‌سازی، می‌توان در نقطه عملکردی $\Phi = 0.9$ نیز، به احتراق با الگوی دمایی مشابه $\Phi = 1$ دست یافت. همچنین، دیده می‌شود که دمای ورودی اکسیدکننده اثر بیشتری بر دمای بیشینه نسبت به دمای خروجی دارد. به‌نظر می‌رسد پیش‌گرم‌سازی قادر به شکستن قله دمایی در نقاط دمابالا بوده و در نتیجه دمای میانگین کاهش یافته است. حذف این نقاط در شکل ۵ نیز دیده می‌شود.

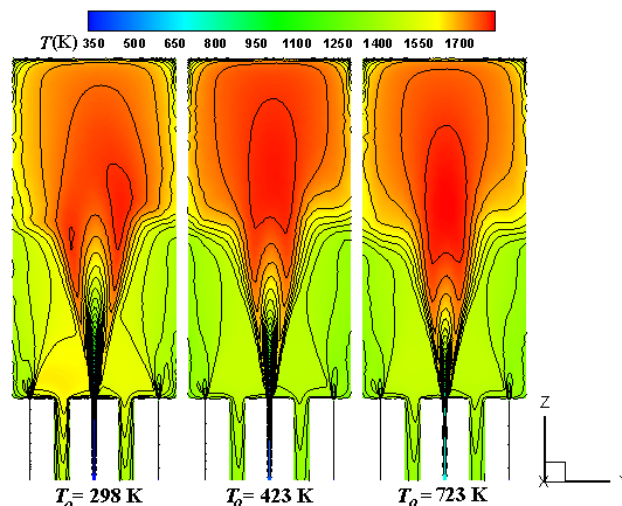


Figure 5- Temperature contours in YZ plane, $X = 0$, at $X_{CO_2} = 30\%$ $\Phi = 1$ for different oxidizer inlet temperature (cases 5,7,8 in table 1)

شکل ۵- کانتورهای دما در صفحه YZ برای دماهای مختلف ورودی اکسیدکننده در $\Phi = 1$ و $X_{CO_2} = 30\%$ برای شرایط عملکردی ۵، ۷، ۸ از جدول ۱

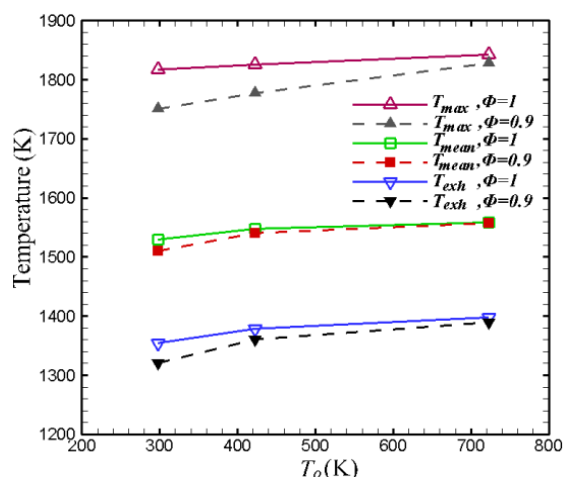


Figure 6- Variations of maximum, mean and exhaust temperatures with oxidizer inlet temperature for $\Phi = 1, X_{CO_2} = 30\%$ and $\Phi = 0.9, X_{CO_2} = 30\%$ (cases 5 and 7-10 in table 1)

شکل ۶- تغییرات دمای بیشینه، میانگین و خروجی محفظه با دمای ورودی اکسیدکننده برای شرایط ورودی $\Phi = 1, X_{CO_2} = 30\%$ و $\Phi = 0.9, X_{CO_2} = 30\%$ (شرایط عملکردی ۵ و ۷-۱۰ در جدول ۱)

در تمامی تست‌های آزمایشگاهی و شبیه‌سازی‌های عددی صورت‌گرفته بر روی این محفظه، ناحیه داغ (با دمای بالا) در قسمت‌های میانی و پایینی محفظه تشکیل می‌شود. اختلاف دمایی بین سردترین نقطه ناحیه احتراق و گرم‌ترین نقطه آن با افزایش دمای پیش‌گرم کم می‌شود. می‌توان اثر تغییر دمای ورودی و نیز اثر رقیق‌سازی بر میدان احتراقی را در تاثیر آن‌ها بر میزان تکانه جت اکسیدکننده (و یا سوخت، در صورت رقیق‌سازی سوخت) جست. تکانه جت اکسیدکننده به‌عنوان تابعی از دمای ورودی اکسیدکننده و چگالی آن به‌صورت رابطه (۲) توصیف می‌شود:

$$G_a = \frac{4\dot{m}_a^2}{\pi\rho_a D_a} \propto \frac{4\dot{m}_a^2 T_a}{\pi D_a} \quad (2)$$

که در آن G_a تکانه جت، \dot{m}_a نرخ جریان جرمی، ρ_a چگالی، D_a قطر نازل و T_a دمای اولیه، و همگی مربوط به جریان اکسیدکننده است. طبق این رابطه با افزایش دمای اکسیدکننده، تکانه جت نیز افزایش یافته و اختلاط و رقیق‌سازی بیشتری را به‌همراه خواهد داشت که موجب افزایش یکنواختی در توزیع دما درون محفظه می‌شود. با حذف نیتروژن در اکسیدکننده و حذف حرارت لازم برای شکستن پیوندهای نیتروژن و عدم تشکیل اکسیدهای نیتروژن مصرف انرژی کاهش یافته و به همین علت دمای میانگین محفظه در شرایط عملکردی مشابه نسبت به احتراق air-MILD بیشتر خواهد بود. از نظر میزان انتشار آلاینده‌ها، محاسبات حاکی از افزایش سطح CO و در مقابل، کاهش CO₂ در خروجی است. در شکل ۷ درصد CO₂ و مقادیر تصحیح‌شده CO برای اکسیژن ۳ درصد در خروجی برای دو نسبت هم‌ارزی $\Phi = 1$ و $\Phi = 0.9$ در خروجی نشان داده شده است. به بیان دیگر، حتی تحت رژیم oxy-MILD نیز، با افزایش دمای ورودی اکسیدکننده، سیستم از شرایط احتراق کامل فاصله گرفته است. نتایج مشابهی توسط مرجع [۳۷] برای سیستم احتراقی O₂/N₂/CH₄ گزارش شده است با افزایش دمای پیش‌گرم، تکانه تزریق افزایش می‌یابد که موجب گردش بیشتر محصولات احتراق شده و در نتیجه آن الگوهای اختلاط در درون محفظه، و تولیدات CO و CO₂ دستخوش تغییر می‌شوند.

تاثیر میزان رقیق‌سازی بر میدان احتراق

عموماً فرایند احتراق اکسیژنی با اکسیدکننده حاوی ۳۵ درصد اکسیژن خالص راه‌اندازی می‌شود. در مقابل، در احتراق MILD، فرایند احتراق با سطح اکسیژن موضعی در حدود ۵ تا ۱۰ درصد و با سرعت کمتری تکامل می‌یابد [۲۴]. غلظت بیشتر اکسیژن ورودی منجر به افزایش دمای شعله و شدت احتراق در مقایسه با رژیم MILD می‌شود که با معیاری همچون انتشار آلاینده‌های

بیشتر و پایداری کمتر همراه است. از این رو، به منظور اجتناب از کاهش راندمان، با افزایش سطح رقیق‌سازی به کمک CO_2 و گردش گازهای حاصل از احتراق، شرایط عملکرد MILD را فراهم می‌آورند. استفاده از میزان بالای CO_2 در ناحیه احتراق، موجب تغییر چشمگیر در سینتیک فرایند احتراق می‌شود. همچنین، اثرات سینتیکی و حرارتی CO_2 می‌تواند موجب تغییر مسیر واکنش اکسیداسیون سوخت شود. در حقیقت، در زمان حضور CO_2 به جای N_2 ، دمای آدیاباتیک شعله و مسیرهای سینتیکی تغییر می‌کند. با پیش‌مخلوط کردن اکسیدکننده با CO_2 ، به دلیل تغییر در چگالی اکسیدکننده، شاهد افزایش تکانه جت ورودی خواهیم بود. به عبارت دیگر، طبق رابطه (۲) رقیق‌سازی اولیه با CO_2 باعث افزایش چگالی مخلوط اکسیدکننده و در نتیجه افزایش تکانه جت تزریق شده می‌شود. (باید توجه کرد که \dot{m}_a خود تابعی از ρ_a است و عملاً تکانه جت با چگالی اکسیدکننده رابطه مستقیم دارد). به این صورت، رقیق‌سازی به افزایش گردش گازهای حاصل از احتراق در داخل محفظه کمک می‌کند. بنابراین، به هنگام استفاده از تکنیک بازگردش گازهای حاصل از احتراق درون محفظه برای تشکیل شعله MILD، به یک حد نصاب بحرانی از تکانه سوخت و اکسیدکننده نیاز است. در شکل ۸، کانتورهای دما در محفظه برای سطوح مختلف رقیق‌سازی به کمک CO_2 نشان داده شده است (شرایط عملکردی ۳-۶ از جدول ۱). دمای ورودی مخلوط اکسیدکننده برابر ۲۹۸ کلوین (۲۵ درجه سانتی‌گراد) در نظر گرفته می‌شود و پیش‌گرم‌سازی اکسیدکننده صورت نگرفته است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با افزایش کسر جرمی CO_2 در میدان احتراق، گرادیان دما به شدت کاهش می‌یابد و ناحیه احتراق مناطق بیشتری از محفظه را دربر می‌گیرد.

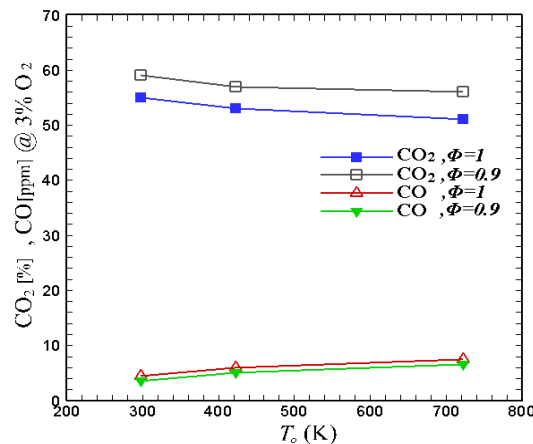


Figure 7- Variation of CO and CO_2 exhaust emissions with oxidizer inlet temperature at $\Phi = 1$, $X_{CO_2} = 30\%$ and $\Phi = 0.9$, $X_{CO_2} = 30\%$ (cases 5 and 7-10 in table 1)

شکل ۷- تغییرات مقادیر CO_2 و CO در خروجی با دمای ورودی اکسیدکننده برای شرایط ورودی $\Phi = 1$ و $X_{CO_2} = 30\%$ ، $\Phi = 0/9$ و $X_{CO_2} = 30\%$ (شرایط عملکردی ۵ و ۷ تا ۱۰ در جدول ۱)

با افزایش سطح حجمی CO_2 در اکسیدکننده به ۵۰ درصد، دمای میانگین شعله به حدود ۱۲۰۰ کلوین کاهش می‌یابد. به علت افزایش ظرفیت گرمایی مخلوط گازی ناشی از افزایش کسر جرمی CO_2 ، عملاً مکانیزم انتقال حرارت درون محفظه تغییر می‌کند و به نوعی، بازده حرارتی افزایش می‌یابد. از آنجایی که ظرفیت گرمایی ویژه CO_2 از N_2 بیشتر است، دمای محفظه در احتراق O_2/CO_2 در شرایط MILD از دمای احتراق air-MILD کمتر است. به منظور کمی‌سازی تاثیر C_p ، تغییرات دمای بیشینه، میانگین و خروجی برای شرایط عملکردی ۳-۶ در شکل ۹ نشان داده شده است. با بهبود میزان انتقال حرارت، بازده حرارتی افزایش یافته و اختلاف دمای بیشینه شعله و دمای گازهای خروجی کاهش می‌یابد. با فرض $\Delta T_{ref} = T_{max} - T_{exh}$ به عنوان مرجعی برای مقایسه میزان انتقال حرارت درون محفظه، به کمک شکل ۸ مشاهده می‌شود که برای $X_{O_2} = 10\%$ ، ΔT_{ref} برابر با ۷۰۰ کلوین است و در حالت $X_{O_2} = 50\%$ ، ΔT_{ref} به حدود ۲۸۰ کلوین کاهش می‌یابد. به عبارت دیگر، با ثابت

نگه داشتن نسبت هم‌ارزی و افزایش میزان رقیق‌سازی در محفظه، انتقال حرارت در محفظه بهبود یافته و توزیع دما یکنواخت‌تر می‌شود.

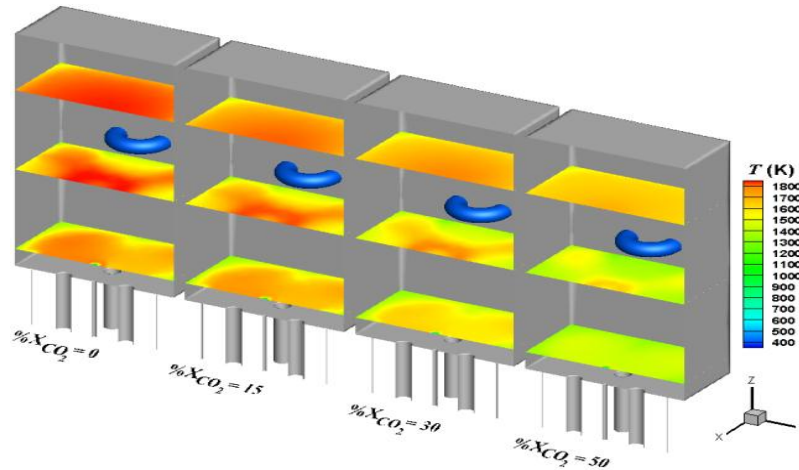


Figure 8- Temperature contours in XY planes at three different heights at $\Phi = 1$, $T_a = 298$ K for different inlet mass fraction of CO_2 in oxidizer mixture (cases 9,10,3,11 in table 1)

شکل ۸- کانتورهای دما در صفحات XY در سه ارتفاع برای مقادیر مختلف کسر جرمی CO_2 در مخلوط اکسیدکننده در $\Phi = 1$ و $T_a = 298$

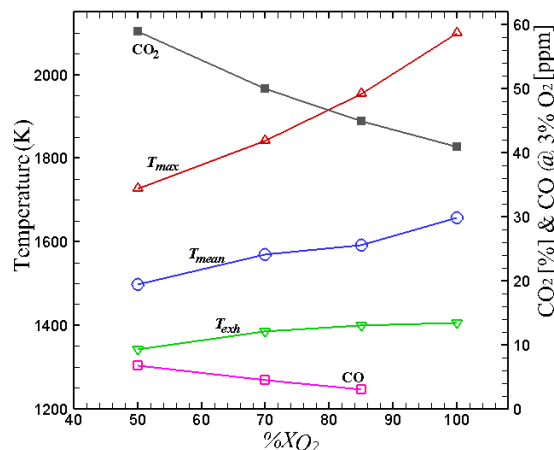


Figure 9- maximum, mean and exhaust temperatures and exhaust emissions of CO and CO_2 for different inlet oxygen volume fractions at $\Phi = 1$, $P = 13$ kW. (cases. 3-6 in table 1)

شکل ۹- دمای آدیاباتیک، بیشینه، میانگین و خروجی محفظه و نیز میزان انتشار CO و CO_2 با تغییرات درصد CO_2 در مخلوط اکسیدکننده برای $\Phi = 1$ و $P = 13$ kW (شرایط عملکردی ۳-۶ در جدول ۱)

همچنین، طبق منبع [۲۴]، دمای محاسبه شده در نقطه $Z = 542/5$ mm و $X = Y = 0$ ، به‌عنوان مرجعی برای دمای میانگین محفظه انتخاب شده است، چراکه این نقطه در بالادست ناحیه احتراق قرار دارد و گردش شدید جریان در محفظه در آن رخ می‌دهد. مطابق شکل ۹، با افزایش رقیق‌سازی، اختلاف دمای بیشینه و دمای میانگین در این ناحیه به کمترین میزان خود می‌رسد که بیانگر کاهش گرادیان دما و نیز بزرگ‌تر شدن ناحیه احتراق با کاهش غلظت اکسیژن مخلوط گازی است. با این حال، باید در نظر داشت که دمای بیشینه قابل‌دستیابی در حالت MILD اکسیژن غنی (غلظت اکسیژن ورودی بیش از ۳۰ درصد) در شرایط مشابه نسبت به MILD اکسیژن رقیق (غلظت اکسیژن ورودی در حدود ۶ درصد) بیشتر خواهد بود [۲۴].

تاثیر میزان رقیق‌سازی بر محصولات احتراق

افزایش CO_2 در اکسیدکننده باعث تغییر در سینتیک شیمیایی احتراق نیز می‌شود. البته نتایج تحقیقات پیشین روی اثر افزایش CO_2 در مخلوط اکسیدکننده، حاکی از اندک‌بودن تاثیرات شیمیایی نسبت به تاثیرات فیزیکی آن است [۲۸]. با این وجود، حضور CO_2 در میدان احتراق air-MILD، باعث کاهش چشمگیر غلظت موضعی رادیکال‌های O و H شده و در نتیجه نرخ کلی احتراق کاهش می‌یابد [۳۷]. همچنین، گردش CO_2 در میدان احتراق باعث تغییراتی در مسیر تشکیل NO شده (در صورت وجود N_2 در مسیر اکسیدکننده) و انتشار آن نیز کاهش می‌یابد [۳۸].

در این پژوهش با تمرکز بر روی احتراق oxy-MILD، به‌منظور درک بهتر مبانی سینتیک شیمیایی این رژیم، مسیر واکنشی CH_4 (به‌عنوان نماینده گاز طبیعی) تحت رقیق‌سازی با CO_2 و براساس مکانیزم DRM-22 بررسی شده است. شکل ۹ مقادیر محاسبه‌شده CO و CO_2 تولیدشده و تصحیح‌شده با اکسیژن ۳ درصد در گاز خروجی را نشان می‌دهد. میزان انتشار CO و CO_2 با بالا رفتن سطح رقیق‌سازی افزایش یافته که تاثیر شیمیایی حضور CO_2 را تایید می‌کند. این رفتار مونوکسیدکربن در مرجع [۳۹] نیز گزارش شده است. ایشان سیستم $CH_4/O_2/CO_2$ را در راکتوری تحت فشار اتمسفری و رقیق‌سازی شدید با CO_2 در گستره دمایی وسیعی مطالعه و افزایش مونوکسیدکربن را گزارش کردند. با وجود این افزایش، مقادیر منتشرشده همچنان بسیار اندک است (کمتر از ۱۰ ppm) که نشانگر احتراق کامل تحت شرایط oxy-MILD است. تحلیل مسیر تبدیل متان به CO_2 اطلاعات مفیدی مرتبط با چگونگی تولید و مصرف گونه‌ها و درک تاثیر شیمیایی CO_2 بر احتراق را ارائه می‌کند. در شکل ۱۰، تحلیل WSR مسیر اکسیداسیون متان (به‌عنوان نماینده گاز طبیعی) به‌کمک نرم‌افزار کمکین نشان داده شده است. در این تحلیل، جریان سوخت با ترکیب جرمی ۸۵٪ متان و ۱۵٪ اتان و جریان اکسیدکننده با ترکیبی مشابه شرایط عملکردی ۴، ۱۵٪ X_{CO_2} و ۶، ۵۰٪ X_{CO_2} از جدول ۱ وارد WSR می‌شوند. در تحلیل WSR مکانیزم کامل DRM-22 تحت فشار ثابت ۱ اتمسفر در مدل WSR به‌کار گرفته شده است. سیستم به‌صورت غیرآدیاباتیک در نظر گرفته شده است و معادله انرژی برای اتلاف حرارتی ثابت به‌میزان ۴/۹۳ kW حل شده است. دمای میانگین مورد نیاز برای محاسبات راکتور ۱۵۴۰ کلوین و زمان اقامت یک ثانیه برای اطمینان از توازن تمام واکنش‌ها و افزایش دقت محاسبات لحاظ شده است. از نرم‌افزار کمکین برای انجام محاسبات WSR استفاده شده است.

واکنش‌های کم‌اهمیت‌تر با نرخ واکنش کمتر از $10^{-12} \text{ gmolcm}^{-3}\text{s}^{-1}$ فیلتر شده‌اند. همان‌طور که دیده می‌شود، رادیکال متیل (CH_3) به‌وسیله رادیکال فرمالدهید (CH_2O) به رادیکال فرمیل (HCO) تبدیل می‌شود. علاوه بر این، مشاهده می‌شود که نرخ تولید CH_2O از طریق CH_3O از تولید مستقیم آن از طریق CH_3 چشمگیرتر است. این نتیجه‌گیری با نتایج گزارش‌شده در مرجع [۲۲] مطابقت دارد. اتان (C_2H_6) از رادیکال‌های متیل تشکیل می‌شود و سپس از طریق استیلن (C_2H_2) به CO تبدیل می‌شود. مردانی و همکاران [۲۲] نیز در تحقیق خود در تحلیل مسیرهای اصلی تولید CO و CO_2 در رژیم احتراق MILD با اکسیژن خالص و مخلوط O_2 ، CO_2 و N_2 به‌طور مشابه با استفاده از یک WSR، تبدیل متیل به هیدروکربن‌های سنگین‌تر را گزارش کردند. در مرجع [۲۳] تبدیل بخشی از متان به CO توسط تبدیل به مولکول‌های سنگین‌تر اتان در شعله MILD توضیح داده شده است. با این حال، مطابق شکل ۱۰، در شرایطی که به‌جای نیتروژن از دی اکسیدکربن به‌عنوان رقیق‌ساز استفاده شده است، با افزایش سطح رقیق‌ساز، نرخ واکنش‌های شاخه سمت راست کاهش یافته است. به عبارت دیگر، اثر هیدروکربن‌های سنگین در تولید CO کاهش می‌یابد. کاهش نرخ واکنش R-12/13 نشانگر این امر است. تاثیر شیمیایی افزایش CO_2 در اکسیدکننده به‌عنوان رقیق‌ساز بر مسیر تبدیل $CO \rightarrow CO_2$ و مسیر آغازشده از $CH_2(s)$ به‌روشنی در شکل ۱۰ نشان داده شده است. با مقایسه نرخ واکنش‌های R-80 و R-81 در دو نمودار، دیده می‌شود که مسیر مستقیم تبدیل متیل CH_2 به CO تقویت شده است. همچنین، واکنش R-88 که نماینده تجزیه CO_2 است، تسریع شده است که بر فعال‌تر شدن رادیکال متیلن $CH_2(s)$ تاکید می‌کند. با این وجود، با توجه به نرخ واکنش‌های نشان‌داده‌شده در نمودار، مشاهده می‌شود که تاثیر حضور CO_2 بر مسیر اصلی تولید CO ($CH_4 \rightarrow CH_3 \rightarrow C_2H_5 \rightarrow HCO \rightarrow CO$) چندان چشمگیر نیست.

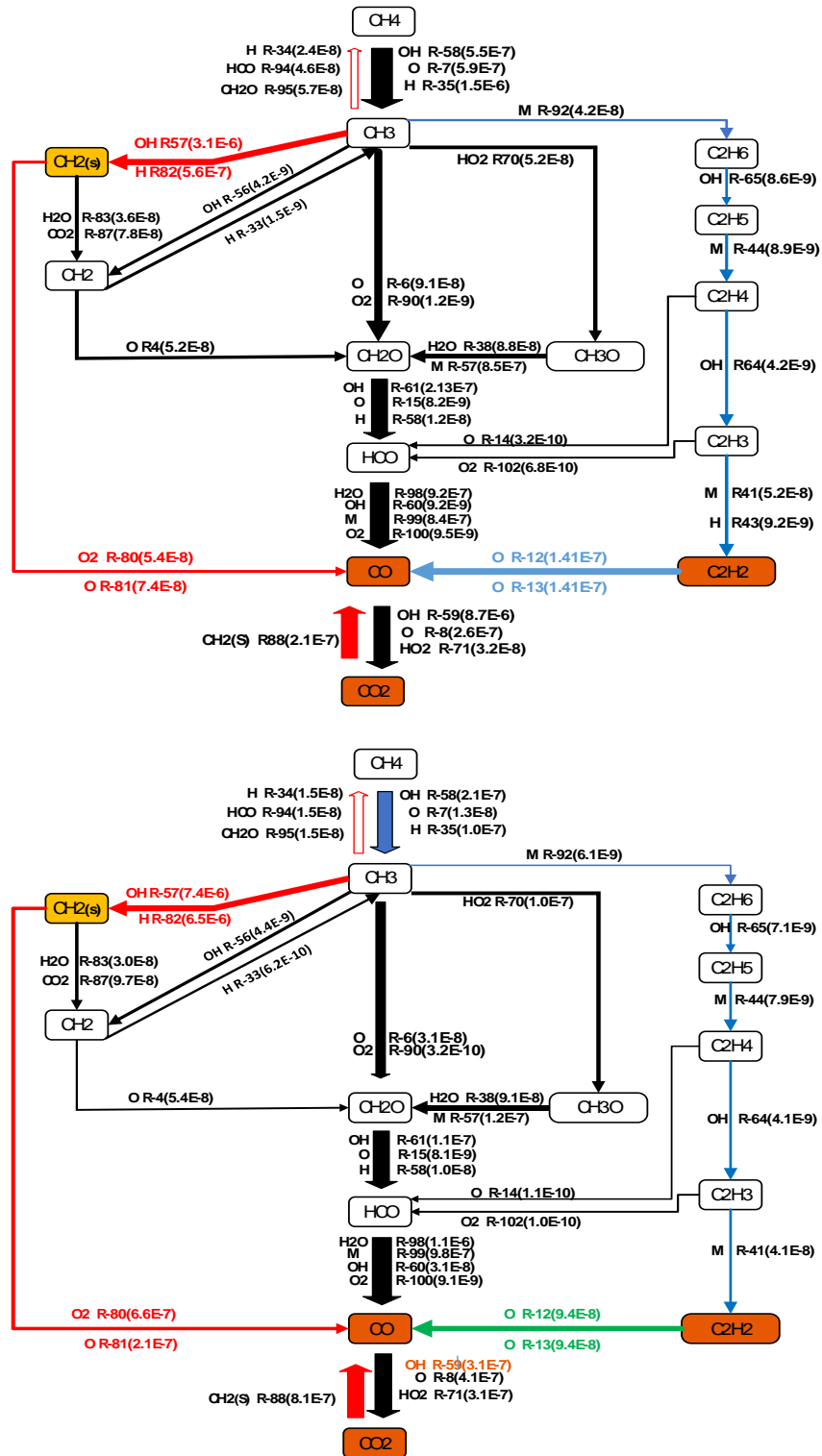


Figure 10- Methane oxidation pathways in a WSR analysis at $T_{WSR} = 1540$ K, $t_R = 1$ s, $p = 1$ atm (up) for $X_{CO_2} = 15\%$ and (down) $X_{CO_2} = 50\%$ (cases 4 and 6 in table 1)

شکل ۱۰- مسیر واکنش متان تحت رقیق‌سازی با CO_2 در شرایط $T = 1540$ K و $p = 1$ atm، $t_R = 1$ s برای $X_{CO_2} = 15\%$ (شکل بالا) و

$X_{CO_2} = 50\%$ (شکل پایین) (شرایط عملکردی ۴ و ۶ در جدول ۱)

تحلیل سینتیکی برای توضیح دلایل افزایش CO در خروجی حاکی از آن است که رقابت CO₂ و O₂ بر سر اتم‌های H منجر به تشکیل CO طی واکنش $\text{CO}_2 + \text{H} \leftrightarrow \text{CO} + \text{OH}$ می‌شود. علاوه بر این امر، واکنش تجزیه CO₂ به همراه واکنش CO₂ با دیگر رادیکال‌های هیدروکربن (CH و CH₂) در تشکیل CO سهیم‌اند. نکته جالب آن است که رقابت در جذب رادیکال H بین CO₂ و CH₄ نیز وجود دارد. در دماهای بالا و خصوصاً در شرایط سوخت-غنی، CO₂ موفق‌تر بوده و منجر به کاهش مصرف CH₄ می‌شود که به معنای کاهش مصرف سوخت است.

نتیجه‌گیری

این مطالعه به بررسی تاثیر میزان رقیق‌سازی و پیش‌گرم‌سازی جریان اکسیدکننده در سیستم احتراقی گاز طبیعی و اکسیدکننده متشکل از O₂/CO₂ در محفظه آزمایشگاهی با جریان معکوس و جت‌های موازی تحت شرایط MILD پرداخته است. در حل عددی از روش RANS و معادلات k-ε همراه با مدل EDC برای شبیه‌سازی سه‌بعدی احتراق استفاده شد. با مقایسه نتایج با داده‌های تجربی از صحت نتایج شبیه‌سازی عددی اطمینان حاصل شد شرایط اولیه به گونه‌ای انتخاب شد که طبق مرجع [۲۴] رژیم احتراق MILD تشکیل شود و تاثیر پارامترها تحت این رژیم بررسی شد در مدل عددی تاثیر افزایش دمای پیش‌گرم و افزایش رقیق‌سازی (افزایش درصد CO₂) در جریان اکسیدکننده به کمک گاز رقیق‌ساز CO₂ بر میدان احتراقی بررسی شد. همچنین، با استفاده از مفهوم WSR، مسیر اکسیداسیون متان تحت مقادیر مختلف از کسر حجمی CO₂ در مسیر اکسیدکننده بررسی شد و نتایج زیر حاصل شد.

- پیش‌گرم‌سازی اکسیدکننده در احتراق oxy-MILD موجب افزایش چشمگیر دمای بیشینه شعله نمی‌شود، بلکه به افزایش انتقال حرارت و شکست قله‌های دمای در نقاط داغ کمک می‌کند. در نتیجه پیش‌گرم‌سازی اکسیدکننده، جت تکانه و اختلاط درون محفظه افزایش یافته که این امر به افزایش تولید CO منجر می‌شود. همچنین، در صورت پیش‌گرم‌سازی اکسیدکننده در $\Phi = 1$ و $\Phi = 0.9$ دمای بیشینه، میانگین و خروجی یکسانی پیش‌بینی می‌شود.
- با افزایش رقیق‌سازی به کمک CO₂، دمای میانگین، خروجی و بیشینه محفظه به شدت کاهش می‌یابد که مقدار آن برای دمای بیشینه چشمگیرتر است. به عبارت دیگر، با رقیق‌تر شدن میدان احتراق در حضور CO₂، به علت بالاتر بودن ظرفیت گرمایی CO₂ نسبت به N₂، اختلاف دمای بیشینه و خروجی در محفظه کاهش می‌یابد و انتقال حرارت درون محفظه افزایش می‌یابد. رقیق‌سازی در یکنواخت‌تر شدن میدان دما از پیش‌گرم‌سازی موثرتر به نظر می‌رسد.
- در بررسی سینتیک شیمیایی مسیر تولید CO در حضور رقیق‌سازی به کمک CO₂، افزایش تولید CO از طریق تولید CH₂O نسبت به مسیر اصلی از طریق فرمالدهید است. همچنین، فعال‌تر شدن رادیکال متیلن در دو مسیر تبدیل مستقیم به CO و نیز تجزیه CO₂ و تبدیل آن به CO (واکنش R-88) و از دیگر تاثیرات شیمیایی افزایش حضور CO₂ در مخلوط است. در مقابل، مسیر تولید CO از طریق استیلن و دیگر هیدروکربن‌های سنگین‌تر تضعیف می‌شود.
- از دیدگاه شیمیایی رقابت بین CH₄ و CO₂ و بین CH₄ و O₂ در جذب رادیکال آزاد H در میدان احتراق، از دلایل افزایش CO هنگام رقیق‌سازی شدید با CO₂ است.

منابع

1. S. Chu, "Carbon Capture and Sequestration," *Science*, 325, 2009, p. 1599.
2. T. Wall, "Combustion processes for carbon capture," *Proceedings of Combustion Institute*, 31, 2007, pp. 31-47.
3. L. Chen, S. Z. Yong and A. F. Ghoniem, "Oxy-Fuel Combustion of Pulverized Coal Characterization, fundamentals, stabilization and CFD modeling," *Progress in Energy and Combustion Science*, 38, 2012, pp. 156-214.
4. F. Normann, K. Andersson, B. Leckner and F. Johnsson, "Emission control of nitrogen oxides in the oxy-fuel process," *Progress in Energy and Combustion Science*, 35, 2009, pp. 385-397.
5. A. Cavaliere and M. de Joannon, "Mild Combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, 30, 2004, pp. 329-366.

6. H. Tsuji, A. K. Gupta, T. Hasegawa, M. Katsuki, K. Kishimoto and M. Morita, *High Temperature Air Combustion*, CRC Press, Boca Paton, FL, 2003.
7. J. A. Wunning and J. G. Wunning, "Flameless oxidation to reduce thermal no-formation," *Progress in Energy and Combustion Science*, 23, 1997, pp. 81–94.
8. R. Weber, S. Orsino, N. Lallemand and A. Verlaan, "Combustion of natural gas with high-temperature air and large quantities of flue gas," *Proceedings Of the Combustion Institute*, 28, 2000, pp. 1315–1321.
9. J. Aminian, C. Galletti, S. Shahhosseini and L. Tognotti, "Numerical Investigation of a MILD Combustion Burner: Analysis of Mixing Field, Chemical Kinetics and Turbulence-Chemistry Interaction," *Flow Turbulence and Combustion*, 84, 2012, pp. 597–623.
10. M. Hallaji, K. Mazaheri, N. Lallemand and A. Verlaan, "Comparison of LES and RANS in numerical simulation of turbulent non-premixed flame under MILD combustion condition," *10th high temp. comb.*, Chia Laguna, Cagliari, Sardinia, Italy, September 11-15, 2011.
11. E. Ebrahimi Fordoei and K. Mazaheri, "Chemical and Physical Effects of Carbon Dioxide Injection with Different Preheating Temperature in Flameless Combustion," *Amirkabir Journal of Mechanical Engineering*, 13, 2018, pp. 49-57.
12. A. Azimi, J. Aminian, "An insight into chemical kinetics and turbulence-chemistry interaction modeling in flameless combustion," *International Journal Of Energy and Environment*, 6, 2015, pp. 383–390.
13. S. R. Shabaniyan, M. Rahimi and A. Cuoci, "Kinetic and fluid dynamic modeling of ethylene jet flames in diluted and heated oxidant stream combustion conditions," *Applied Thermal Engineering*, 52, 2013, pp. 538–555.
14. A. Mardani and S. Tabejamaat, "Numerical study of flame structure in the mild combustion regime," *Thermal Science*, 19, 2015, pp. 21–34.
15. R. S. Haszeldine, "Carbon Capture and Storage: How Green Can Black Be?" *Science*, 325, 2009, pp. 1647–1652.
16. N. Lallemand, F. Breussin, R. Weber, T. Ekman, J. Dugue, J.M. Samaniego, O.Charon, A.J. Van Den Hoogen, J. Van Der Bemt, W. Fujisaki, T. Imanari, T. Nakamura and K. Iino, "Flame structure, heat transfer and pollutant emissions characteristics of oxy-natural gas flames in the 0.7-1 MW thermal input range," *Journal of the energy institute*, 73, 2000, pp. 169–182.
17. N. Krishnamurthy, P. J. Paul and W. Blasiak, "Studies on low-intensity oxy-fuel burner," *Proceedings of combustion institute*, 32, 2009, pp. 3139–3146.
18. J. Von Scheele, M. Gartz, R. Paul, M. T. Lantz, J. P. Riegert and S. Soderlund, "Flameless oxyfuel combustion for increased production and reduced CO₂ and NO_x emissions," *Stahl Eisen*, 128, 2008, pp. 35–40.
19. H. Stadler, D. Ristic, M. Forster, A. Schuster, R. Kneer and G. Scheffknecht, "NO_x-emissions from flameless coal combustion in air, Ar/O₂ and CO₂/O₂," *Proceedings of combustion institute*, 32, 2009, pp. 3131–3138.
20. A. Khalil and A. K. Gupta, "Flame fluctuations in Oxy-CO₂-methane mixtures in swirl assisted distributed combustion," *Applied Energy*, 204, 2017, pp. 303–317.
21. A. Mardani, S. Tabejamaatz and S. Hassanpour, "Numerical study of CO and CO₂ formation in CH₄/H₂ blended flame under MILD condition," *Combustion and flame*, 160, 2013, pp. 1636–1649.
22. A. Mardani and A. Fazlollahi Ghomshi, "Numerical study of oxy-fuel MILD (moderate or intense low-oxygen dilution combustion) combustion for CH₄/H₂," *Fuel and Energy*, 99, 2016, pp. 136–151.
23. P. Sabia, G. Sorrentino, A. Chinnici, A. Cavaliere and R. Ragucci, "Dynamic behaviors in methane MILD and oxy-fuel combustion. Chemical effect of CO₂," *Energy and Fuels*, 29, 2015, pp. 1978–1986.
24. P. Li, B. B. Dally, J. Mi and F. Wang, "MILD oxy-combustion of gaseous fuels in a laboratory-scale furnace," *Combustion and Flame*, 160, 2013, pp. 933–946.
25. [25] P. Li, F. Wang, Y. Tu, Z. Mei, J. Zhang, Y. Zheng, H. Liu, Z. Liu, J. Mi and C. Zheng, "Moderate or Intense Low-Oxygen Dilution Oxy-combustion Characteristics of Light Oil and Pulverized Coal in a Pilot-Scale Furnace," *Energy and Fuels*, 28, 2014, pp. 1524–1535
26. D. Perrone, T. Castiglione, A. Klimanek, P. Morrone and M. Amelio, "Numerical simulations on Oxy-MILD combustion of pulverized coal in an industrial boiler," *Fuel Processing Technology*, 181, 2018, pp. 361–374.
27. G. G. Szego, B. B. Dally and G. J. Nathan, "Operational characteristics of a parallel jet MILD combustion burner system," *Combust Flame*, 156, 2009, pp. 429–38.
28. G. G. Szego, *Experimental and Numerical Investigation of a Parallel Jet Mild Combustion Burner System in a Laboratory Scale Furnace*, PhD Thesis, School of Engineering, The University of Adelaide, Adelaide, South Australia, Australia, 2010.
29. S. B. Pope, "Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation," *Combustion Theory and Modelling*, 1, 1997, pp. 41–63.
30. S. A. Orszag, V. Yakhot, W. S. Flannery, F. Boysan, D. Choudhury, J. Maruzewski and B. Patel, "Renormalization, Group Modeling and Turbulence Simulations," *International Conference on Near-Wall Turbulent Flows*, Tempe, Arizona, 1993.
31. 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, 2011, pp. 537–567.
32. M. Mortberg, W. Blasiak and A. K. Gupta, "Experimental investigation of flow phenomena of a single fuel jet in cross-flow during highly preheated air combustion conditions," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 129, 2007, pp. 556–564.

33. 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, 2008, pp. 7553–7564.
34. G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song, W. C. Gardiner, V. V. Lissianski and Z. Qin, GRI-Mech 3.0, <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>, Accessed 24 Sep. 2018.
35. E. Ebrahimi Fordoei, K. Mazaheri and F. Ehsani Derakhshan, "Numerical Study of Chemical Kinetic and Radiation Model Effects on the Velocity and Temperature Fields in Natural Gas- Oxygen Combustion by Using of Steady Flamelet Model," *Fuel and Combustion*, 11, No. 1, pp. 29-48, 2018. (in Persian)
36. Z. Mei, J. Mi, F. Wang and Z. Zheng, "Dimensions of CH₄-Jet Flame in Hot O₂/CO₂ Coflow," *Energy Fuels*, 26, 2012, pp. 3257–3266.
37. 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.
38. F. Liu, H. Guo and G. J. Smallwood, "A numerical study of soot aggregate formation in a laminar co-flow diffusion flame," *Combustion and Flame*, 133, 2003, pp. 495–497.
39. P. Glarborg and L. L. Bentzen, "Chemical Effects of a High CO₂ Concentration in Oxy-Fuel Combustion of Methane," *Energy and Fuels*, 22, 2008, pp. 291–296.

English Abstract

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

Mohamad Hassan Moghadasi¹, Rouzbeh Riazi^{2*}, Sadegh Tabejamaat³ and Amir Mardani⁴

1- Department of Aerospace Engineering, University of Tehran, Tehran, Iran. Mh.moghadasi@ut.ac.ir

2- Department of Aerospace Engineering, University of Tehran, Tehran, Iran. Ro_riazi@ut.ac.ir

3- Department of Aerospace Engineering, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran. Sadegh@aut.ac.ir

4- Department of Aerospace Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran. amardani@sharif.edu

*Corresponding Author

(Received: 2018.12.13, Received in revised form: 2019.3.2, Accepted: 2019.3.25)

In this study, oxy-combustion is numerically investigated under MILD conditions. This novel combination is simulated in a laboratory-scale furnace with parallel fuel and oxidant jets and a recirculating flow. With nitrogen removal from the oxidant stream, zero NO_x emission for gaseous fuel systems is expected. Combustion field is modelled using a well-stirred reactor and computational fluid dynamics. In the CFD modelling, RANS equations are solved using the RNG k-ε and EDC model is employed to model the turbulence-chemistry interaction. The effect of oxidizer preheating and CO₂ dilution on the combustion field as well as flue gas composition is investigated. The results indicate that the maximum flame temperature does not experience a significant increase when the preheat temperature rises, positively affecting the temperature distribution at the cost of CO emission which is a direct consequence of higher recirculation and mixing rate. Also, a kinetic study on the chemical effect of CO₂ presence reveals that CO production path through CH₃O radical is more strengthened compared to the main path through formaldehyde when increasing the dilution level. When diluting the oxidant, methylene's role becomes more influential in CO formation than when pure oxygen is used, contributing to higher CO emission. CO₂ defeats CH₄ and O₂ to absorb the free H radicals, causing higher levels of CO production.

Keywords: Oxy-combustion, MILD combustion, CO₂ dilution, Numerical analysis