

## مطالعه عددی تاثیر شرایط حرارتی دیواره و ترکیب اکسنده بر ساختار شعله و رژیم احتراقی در کوره احتراق غیرپیش آمیخته

محمدامین عطارزاده<sup>1</sup>، سید عبدالمهدی هاشمی<sup>2\*</sup> و اسماعیل ابراهیمی فردویی<sup>3</sup>

1- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه کاشان، کاشان، mohamadamin.atarzadeh@gmail.com

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

3- دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، E.brahimifordoei@modares.ac.ir

\* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: 1400/05/19، دریافت آخرین اصلاحات: 1400/06/21، پذیرش: 1400/10/25)

**چکیده:** هدف از مطالعه حاضر بررسی تاثیر شرایط حرارتی دیواره و ترکیب اکسنده روی ساختار شعله و محدوده تشکیل رژیم‌های احتراقی معمولی، دما بالا و بدون شعله است. بدین منظور کوره احتراق غیرپیش آمیخته دانشگاه لیسبون با استفاده از نرم افزار متن باز اپن فوم و همچنین محاسبات شیمیایی به کمک حلگر شعله نفوذی جریان متقابل بررسی شده‌اند. در مطالعه عددی از مدل‌های آشفنگی k-ε استاندارد، احتراقی مفهوم اتلاف گردابه اصلاح شده و تشعشعی DO همراه با ضرایب جذب و گسیل جسم خاکستری در شش طول باند مختلف استفاده شده است. مطابق با نتایج، تغییر ترکیب اکسنده و شرایط حرارتی دیواره، مسیرهای واکنشی را تغییر می‌دهد. جایگزینی CO<sub>2</sub> با N<sub>2</sub> درون اکسنده و تلفات حرارتی سبب می‌شود تا بیشینه رادیکال هیدروکسیل کاهش یافته و با افزایش فاصله محوری آغاز واکنش‌های شیمیایی، تاخیر در اشتعال افزایش یابد. عامل اصلی تغییر ساختار شعله با جایگزینی CO<sub>2</sub> با N<sub>2</sub> در رژیم‌های معمولی و بدون شعله همراه با اتلاف حرارتی به ترتیب اثرات فیزیکی از طریق واکنش‌های O+H<sub>2</sub>O⇌OH+H<sub>2</sub>O، O+CH<sub>4</sub>⇌OH+CH<sub>3</sub> و 2OH⇌O+H<sub>2</sub>O و اثرات شیمیایی به وسیله واکنش‌های H+O<sub>2</sub>⇌O+OH و H+OH+M⇌H<sub>2</sub>O+M اند. در رژیم احتراق دما بالا سهم اثرات فیزیکی و شیمیایی روی ساختار شعله تقریباً برابر بوده و واکنش‌های O+H+M⇌OH+M، OH+CO⇌H+CO<sub>2</sub> و OH+HO<sub>2</sub>⇌O<sub>2</sub>+H<sub>2</sub>O عامل کاهش هیدروکسیل اند.

**کلیدواژگان:** احتراق غیرپیش آمیخته، رژیم احتراقی، ترکیب اکسنده، شرایط حرارتی دیواره، ساختار شعله

### مقدمه

منبع اصلی تولید انرژی در سیستم‌های مصرف کننده توان، استفاده از سوخت‌های فسیلی در فرایندهای احتراقی است. در دهه‌های اخیر و با توجه به چالش‌های مختلف به وجود آمده در ارتباط با احتراق این سوخت‌ها (بحران‌های اول و دوم انرژی در سال‌های 1973 و 1979 میلادی، بحران ناشی از تولید بیش از حد آلاینده‌های سمی ناکس و مونوکسید کربن در دهه 1990 میلادی و چالش ناشی از گرمایش کره زمین در اثر انتشار گازهای گلخانه‌ای در قرن بیست و یکم)، مطالعات گسترده‌ای پیرامون دست‌یابی به سیستم‌های احتراقی با بازدهی بالا و انتشار کم آلاینده‌ها به همراه گازهای گلخانه‌ای انجام شده است. از جمله روش‌های کاهش آلاینده‌ها می‌توان به استفاده از مشعل‌های چرخشی [1]، مشعل‌های با انتشار ناکس کم [2] و احتراق بدون شعله [3] اشاره کرد، در حالی که یکی از روش‌های کاربردی و عملی برای کاهش انتشار دی‌اکسید کربن به عنوان اصلی‌ترین گاز گلخانه‌ای، جداسازی و ذخیره‌سازی CO<sub>2</sub> تولید شده از طریق احتراق سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی است [4].

دسته‌بندی‌های متفاوتی برای شرایط حاکم بر تشکیل رژیم‌های احتراقی ارائه شده است. یکی از دسته‌بندی‌های اصلی انجام شده که تاثیر قابل توجهی بر روی بازدهی و انتشار آلاینده‌ها به ویژه ناکس تحت شرایط احتراق غیرپیش آمیخته دارد، فرایند

احتراق را به رژیم‌های دما بالا، بدون شعله و معمولی دسته‌بندی می‌کند. این دسته‌بندی در مطالعات مختلف براساس شرایط حرارتی و یا میزان نرخ بازچرخش محصولات داغ احتراقی درون جریان اکسنده انجام شده است. وونینگ [5] در مطالعه خود به تقسیم‌بندی نواحی احتراقی به سه قسمت احتراق معمولی، ناحیه گذر از احتراق معمولی به احتراق بدون شعله و احتراق بدون شعله پرداخت. این دسته‌بندی براساس پارامتر بازچرخش محصولات احتراق به درون جریان اکسنده انجام پذیرفته و گزارش شده است که احتراق معمولی در تمامی دماهای کوره تحت نرخ‌های بازچرخش بسیار کوچک (کمتر از 0/5) قابل حصول است، در حالی که برای دست‌یابی به احتراق بدون شعله لازم است تا مقادیر نرخ بازچرخش محصولات به منظور رقیق‌سازی شدید واکنش‌دهنده‌ها به صورت قابل توجهی افزایش یافته (مقادیر نرخ بازچرخش بیشتر از 3) و دمای کوره بیش از دمای خوداشتعالی سوخت باشد. کوالیر و دی‌جوانون [6] در مطالعه خود به ارائه دسته‌بندی جدیدی برای رژیم‌های احتراقی با استفاده از مخلوط متان/نیتروژن/اکسیژن پرداختند. در این مطالعه از دمای ورودی واکنش‌دهنده‌ها و اختلاف دمای بیشینه واکنشگاه اختلاط ایده‌آل<sup>1</sup> با دمای ورودی جهت تعیین مرز میان رژیم‌های مختلف احتراقی استفاده شده است. بر اساس کار انجام شده توسط ایشان، احتراق معمولی در شرایط دمای ورودی واکنش‌دهنده کمتر از دمای خوداشتعالی سوخت و اختلاف دمای بیشینه احتراق با دمای ورودی بیش از دمای خوداشتعالی حاصل می‌شود ( $T_{in} < T_{aut}$  و  $\Delta T = T_{max} - T_{in} > T_{aut}$ )، درحالی‌که رژیم‌های احتراقی دما بالا و بدون شعله زمانی تشکیل می‌شوند که دمای واکنش‌دهنده‌ها بالاتر از دمای خوداشتعالی سوخت ( $T_{in} > T_{aut}$ ) بوده و اختلاف دمای بیشینه واکنشگاه با مخلوط احتراقی به ترتیب بیشتر ( $\Delta T = T_{max} - T_{in} > T_{aut}$ ) و کمتر ( $\Delta T = T_{max} - T_{in} < T_{aut}$ ) از دمای خوداشتعالی سوخت باشد. دی‌جوانون و همکاران [7-9] در سه مطالعه خود به ترسیم نقشه رژیم‌های مختلف احتراقی با استفاده از شبیه‌سازی شعله نفوذی جریان متقابل<sup>2</sup> پرداختند. نتایج به‌دست آمده از این بررسی‌ها نشان دهنده آن است که با افزایش فشار، از محدوده تشکیل احتراق بدون شعله کاسته شده و سهم احتراق دما بالا در نقشه رژیم‌های مختلف احتراقی افزایش می‌یابد. از طرف دیگر ناحیه گذر میان انتقال از احتراق معمولی به احتراق بدون شعله و دما بالا تحت دسته‌بندی معرفی شده توسط کوالیر و دی‌جوانون برای اولین بار در نظر گرفته شده است. لووان و همکاران [10] به مطالعه نقش دمای پیش‌گرمایش و کسر جرمی اکسیژن درون اکسنده بر روی محدوده رژیم‌های احتراقی با استفاده از شبیه‌سازی واکنشگاه اختلاط ایده‌آل پرداختند. مطابق با نتایج حاصل از مطالعه ایشان، افزایش دمای پیش‌گرمایش و کاهش کسر جرمی اکسیژن موجود در اکسنده می‌تواند منجر به تشکیل ناحیه گسترده‌تری از احتراق بدون شعله بدون شرط<sup>3</sup> شود همچنین در این مطالعه مشاهده شده است که افزودن بخار آب به اکسنده می‌تواند منجر به تسهیل در تشکیل احتراق بدون شعله به علت افزایش جذب حرارت به وسیله بخار آب شود.

مطالعه ساختار شعله و مشخصه‌های فرایند احتراق می‌تواند ضمن دست‌یابی به فهم عمیق‌تر از شرایط عملکردی سیستم، منجر به بهینه‌سازی آن و فراهم نمودن شرایط جهت تغییر رژیم احتراقی شود. مطالعات گوناگونی در ارتباط با مشخصه‌های فرایند احتراق در کوره‌های غیرپیش‌آمیخته تحت رژیم‌های مختلف انجام شده است. ثابت و همکاران [11] به مطالعه ساختار شعله‌های غیرپیش‌آمیخته آشفته با استفاده از سوخت متان/هیدروژن پرداختند. در این پژوهش برای بررسی ساختار شعله روی اختلاط و نرخ بازچرخش تمرکز شده است. نتایج بدست آمده نشان دهنده آن است که افزودن هیدروژن به متان سبب می‌شود تا مصرف متان به صورت چشمگیری افزایش پیدا کرده و نرخ بازچرخش شدیدتری درون محفظه احتراق مشاهده شود. علاوه‌براین در این مطالعه تاثیر هیدروژن روی کاهش زمان اقامت و همچنین کاهش طول و ضخامت شعله گزارش شده است. دوان و سوامیناتان [12] با استفاده از شبیه‌سازی عددی به مطالعه انتشار شعله و فرایند خوداشتعالی در شعله‌های غیرپیش‌آمیخته تحت اکسنده رقیق‌سازی و پیش‌گرم شده پرداختند. در این مطالعه گسترش چشمگیر ناحیه وقوع واکنش‌های

1. Well-Stirred-Reactor (WSR)  
2. Counterflow Diffusion Flame  
3. Unconditional Flameless Combustion

شیمیایی تحت رژیم بدون شعله در مقایسه با رژیم احتراق معمولی مشاهده شده است. افزون بر این تاخیر در اشتعال تحت شرایط اکسندة رقیق‌سازی و پیش‌گرم شده به صورت قابل توجهی افزایش می‌یابد که این موضوع اهمیت کاهش کسر جرمی اکسیژن بر روی تاخیر در اشتعال را نشان می‌دهد. جاراول و همکاران [13] به مطالعه ساختار شعله سندیا دی<sup>1</sup> با استفاده از شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ پرداختند. مطابق با نتایج این مطالعه، حضور شعله پیلوت در مشعل سندیا موجب می‌شود تا فرایند اختلاط دستخوش تغییرات زیادی شده به گونه‌ای که شعله در ناحیه‌ای با برهمکنش شدید میان جت مرکزی با گازهای داغ پیلوت و هوای تازه ورودی تشکیل می‌شود. تحلیل ساختار موضعی شعله در احتراق متان-هوا تحت رژیم‌های مختلف احتراقی توسط باتز و همکاران [14] انجام شد. در این بررسی به کمک اندازه‌گیری‌های تجربی و براساس مقادیر نرخ آزادسازی حرارت بیشینه، رژیم‌های احتراقی به چهار دسته غیرپیش‌آمیخته، غیرپیش‌آمیخته غالب، پیش‌آمیخته غالب و پیش‌آمیخته دسته‌بندی شدند.

شرایط حرارتی حاکم بر دیواره و ترکیب اکسندة می‌توانند تاثیر قابل توجهی بر رژیم احتراقی و ساختار شعله داشته باشند. با اینکه مطالعات انجام شده در ارتباط با بررسی پارامترهای مختلف روی دسته‌بندی رژیم‌های مختلف و ساختار شعله‌های غیرپیش‌آمیخته که تعداد زیادی از آن‌ها در این قسمت مرور شد، مطالعه‌ای در ارتباط با تاثیر شرایط مرزی دیواره و تغییر ترکیب اکسندة روی رژیم‌های احتراقی و ساختار شعله انجام نشده است. از این رو در مطالعه حاضر از دو شبیه‌سازی مختلف برای محاسبه کمی پارامترهای مختلف و تحلیل کیفی نتایج استفاده شده است؛ شبیه‌سازی اول مربوط به کوره احتراق غیرپیش‌آمیخته با استفاده از حلگر اصلاح شده ReactingFOAM از نرم افزار متن‌باز این فوم است که به منظور دستیابی به اطلاعاتی جزئی از شرایط احتراقی، ساختار شعله و انتشار آلاینده‌ها انجام شده است (در شبیه‌سازی عددی ابتدا به اعتبارسنجی حلگر و مدل‌های مختلف انتخاب شده به منظور مطالعه عددی پرداخته و سپس با استفاده از تغییرات دمای داخل کوره و تغییرات رادیکال هیدروکسیل تاثیر ترکیب اکسندة و شرایط حرارتی دیواره کوره روی ساختار شعله مورد بحث و بررسی قرار می‌گیرد)، در حالی که شبیه‌سازی دوم مربوط به محاسبات شیمیایی (تحلیل حساسیت) و تعیین محدوده رژیم‌های احتراقی معمولی، بدون شعله و دما بالا است. این قسمت به کمک حلگر شعله نفوذی جریان متقابل از کد OPPDIF موجود در پکیج کمیکن [15] و به‌عنوان ابزاری کمکی با هدف تحلیل نتایج به‌دست آمده از شبیه‌سازی‌های عددی و تعیین محدوده رژیم‌های مختلف احتراقی با توجه به تطابق آن با شرایط ارائه شده برای رژیم‌های مختلف مطابق با مطالعات گذشته انجام شده است [9, 16-18].

## کوره احتراق غیرپیش‌آمیخته

### هندسه کوره احتراق غیرپیش‌آمیخته

به‌منظور بررسی تاثیر ترکیب اکسندة و شرایط حرارتی حاکم بر دیواره کوره روی ساختار شعله و انتشار مونوکسید کربن، شبیه‌سازی کوره احتراق غیرپیش‌آمیخته دانشگاه لیسبون<sup>۲</sup> پرتغال مورد توجه قرار گرفته است [19]. مطابق با شکل 1 این کوره شامل سه قسمت لوله ورودی سوخت و هوا، محفظه احتراق و دودکش منتقل‌کننده محصولات داغ احتراقی به محیط است. قسمت اول شامل مجرای ورودی سوخت و اکسندة است که در آن متان خالص به‌عنوان سوخت از مجرای میانی به قطر 4 و طول 21 میلی‌متر به درون محفظه احتراق تزریق می‌شود. جریان هوای پیش‌گرم شده نیز از طریق مجرای حلقوی پیرامون ورودی سوخت با قطرهای داخلی و خارجی 6 و 15 میلی‌متر با طول برابر با لوله سوخت به درون محفظه احتراق وارد می‌شود. سوخت و هوا درون محفظه احتراق که به‌ترتیب قطر و طولی معادل با 150 و 300 میلی‌متر دارد با یکدیگر مخلوط شده و فرایند احتراق درون محفظه به وقوع می‌پیوندد. برای اتصال محفظه احتراق به دودکش از هندسه نازل همگرا به طول 50 میلی‌متر

استفاده شده است که این هندسه امکان بازچرخش شدید محصولات داغ احتراقی را جهت حصول رژیم‌های مختلف احتراقی فراهم می‌آورد. دودکش نیز استوانه‌ای با قطر و طول 85 و 150 میلی‌متر است.

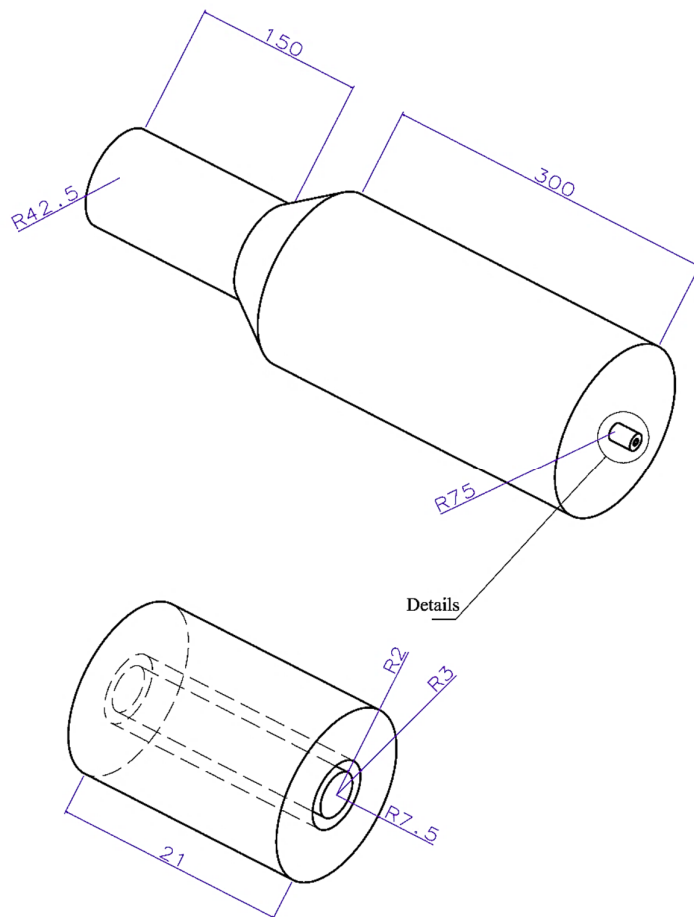


Figure 1- Dimensions of non-premixed combustion chamber (dimensions are based on mm)

شکل 1- ابعاد محفظه احتراق غیر پیش‌آمیخته (ابعاد بر حسب میلی‌متر هستند) [19]

### شرایط مرزی حاکم بر کوره احتراق غیرپیش‌آمیخته

بررسی تجربی کوره غیرپیش‌آمیخته انتخاب شده در مطالعه حاضر، در شرایط مختلف ورودی که منجر به عملکرد کوره در دو توان 10 و 15/6 کیلووات می‌شود، انجام گرفته است. برای کوره 10 کیلووات داده‌های کامل تجربی شامل توزیع شعاعی دما و کسر حجمی خشک گونه‌ها در فواصل شعاعی مختلف ارائه شده است، در حالی که برای کوره 15/6 کیلووات تنها داده‌های مربوط به خروجی گازهای داغ احتراقی در مطالعه تجربی اندازه‌گیری شده‌اند. از این رو در مطالعه حاضر به‌منظور اعتبارسنجی مدل‌های مختلف انتخاب شده جهت حل عددی و شرایط حاکم بر حلگر از شرایط حاکم بر کوره 10 کیلووات استفاده شده است. در ادامه بررسی و به‌منظور مطالعه تاثیر ترکیب اکسنده بر شرایط احتراقی، از شرایط کوره 15/6 کیلووات به‌منظور جلوگیری از خاموشی شعله در اثر تغییر محیط اکسنده در رژیم‌های مختلف احتراقی استفاده شده است.

در مطالعه حاضر سوخت ورودی متان و اکسنده جریان هوای سرعت بالا است که در ورودی هر یک کسر مولی متناظر با ترکیب آن‌ها به‌عنوان شرایط مرزی در نظر گرفته شده است. شرایط ورودی مربوط به هر یک از کوره‌ها در جدول 1 ارائه شده

است. همچنین دمای دیواره محفظه نیز در این جدول آورده شده است. برای سایر دیواره‌ها مطابق با مطالعه تجربی شرط مرزی عایق حرارتی در نظر گرفته شده است. همچنین برای خروجی دودکش نیز از شرط مرزی فشار خروجی استفاده شده است.

جدول 1- شرایط مرزی ورودی جریان سوخت و اکسند درون کوره احتراق غیرپیش‌آمیخته

Table 1- Boundary conditions of fuel and oxidant inlet flow in non-premixed combustion furnace

Non-premixed furnace with 10 kW thermal power				Non-premixed furnace with 15.6 kW thermal power			
Variable	Magnitude	Variable	Magnitude	Variable	Magnitude	Variable	Magnitude
$u_{ox}$ (m/s)	104	$T_{ox}$ (K)	773	$u_{ox}$ (m/s)	155	$T_{ox}$ (K)	773
$u_{fuel}$ (m/s)	24.4	$T_f$ (K)	293	$u_{fuel}$ (m/s)	38.1	$T_f$ (K)	293
$T_w$ (K)	1173			$T_w$ (K)	1261		

### روش حل عددی کوره احتراق غیرپیش‌آمیخته

برای شبیه‌سازی عددی کوره احتراقی از حلگر ReactingFOAM نرم‌افزار متن باز این فوم با انجام اصلاحاتی برای انجام محاسبات انتقال حرارت تشعشی و همچنین کاربرد مدل احتراقی موجود در آن برای کاربرد در رژیم‌های مختلف احتراقی استفاده شده است. شرایط هندسی و فیزیکی حاکم بر کوره غیرپیش‌آمیخته سبب شده تا حل جریان واکنشی درون آن به صورت متقارن محوری انجام شود. با توجه به مطالعه ربولا و همکاران [20] بر روی انتخاب مدل آشفتگی مناسب برای حل عددی کوره حاضر، از مدل  $k-\epsilon$  استاندارد جهت مدل‌سازی عبارت تنش رینولدز در معادلات تکانه استفاده شده است. مدل‌سازی برهمکنش میان آشفتگی و شیمی جریان نیز با استفاده از مدل احتراقی مفهوم اتلاف گردابه اصلاح شده [21] که برای شبیه‌سازی رژیم‌های مختلف احتراقی توسعه داده شده به همراه سینتیک شیمیایی GRI-Mech 3.0 شامل 53 گونه و 325 واکنش انجام شده است [22]. همچنین محاسبات مربوط به ترم چشمه انتقال حرارت تشعشی در معادله انرژی با استفاده از مدل فاز گسسته<sup>۱</sup> و مدل جمع وزنی گازهای خاکستری<sup>۲</sup> با محاسبه ضرایب جذب و گسیل در شش طول باند مختلف مطابق با جدول 2 که در مطالعات مختلف گذشته مورد استفاده قرار گرفته است [23, 24]، انجام شده است.

جدول 2- مقادیر ضرایب جذب و گسیل گازها در طول موج‌های مختلف در کسر جرمی‌های 0.50 و 77 درصدی  $CO_2$

Table 2- Values of absorption and emission coefficients of gases at different wavelengths at  $CO_2$  mass fractions of 0, 50 and 77 percentage

CO <sub>2</sub> Mass Fraction (%)	Wavelength ( $\mu m$ )					
	0-2.5	2.5-3	3-4	4-5	5-9	9-20
0	0	0.75	0	0.78	0	0.72
50	0	0.79	0	0.82	0	0.75
77	0	0.82	0	0.85	0	0.78

از الگوریتم پیمپل<sup>۴</sup> که ترکیبی از الگوریتم‌های پیژو<sup>۵</sup> و سیمپل<sup>۱</sup> است. به منظور برطرف کردن کوپلینگ میان سرعت و فشار استفاده شده است. گسسته‌سازی عبارات مختلف در معادلات بقا با استفاده از روش آپویند مرتبه دوم<sup>۶</sup> صورت گرفته است. معیار همگرایی حل عددی نیز رسیدن باقی‌مانده تمام متغیرها به کمتر از  $10^{-7}$  در هر گام زمانی و کاهش تغییرات دما، سرعت و غلظت گونه‌های اصلی در خروجی کوره به کمتر از 0/5 درصد در مدت زمان 0/5 ثانیه است.

1. Modified Eddy Dissipation Concept Model
2. Discrete Ordinate
3. Weighted Sum of Gray Gases Model
4. PIMPLE
5. PISO
6. SIMPLE
7. Second-Order Upwind

## هندسه، معادلات تحلیل حساسیت و شرایط حاکم بر شعله نفوذی جریان متقابل

در مطالعه حاضر به منظور تحلیل شیمیایی نتایج شبیه‌سازی‌های عددی و همچنین بررسی تاثیر شرایط دمایی دیواره و ترکیب اکسنده روی نقشه رژیم‌های مختلف احتراقی، از حلگر شعله نفوذی جریان متقابل موجود در کد OPPDIF پکیج کمکین [15] استفاده شده است. با توجه به نیاز به تعداد بالای محاسبات جهت انجام تحلیل حساسیت و یافتن محدوده رژیم‌های احتراقی معمولی، بدون شعله و دما بالا، مشابه با مطالعات گوناگون پیشین [3, 7-9, 16] و همچنین با توجه به قابلیت استفاده از این حلگر در تمامی رژیم‌های احتراقی مختلف، شبیه‌سازی شعله نفوذی جریان متقابل مورد توجه قرار گرفته است. شرایط مرزی حاکم بر حلگر شعله نفوذی جریان متقابل در شکل 2 نشان داده شده است. سرعت و دمای جریان سوخت که در بررسی حاضر متان است، ثابت و به ترتیب برابر با  $100 \text{ cm/s}$  و  $300 \text{ K}$  در نظر گرفته شده است. دمای اکسیدکننده که مخلوطی با کسر مولی‌های متفاوت از اکسیژن، نیتروژن و دی‌اکسید کربن است، با توجه به دمای پیش گرمایش مخلوط متغیر بوده و در بررسی‌های انجام شده بین  $300$  تا  $2400$  کلوین در نظر گرفته شده است. افزون بر این، سرعت اکسنده با برابر قرار دادن تکانه جریان سوخت و اکسنده محاسبه شده است. برابری تکانه جریان‌ها سبب می‌شود تا صفحه سکون بین نازل‌های سوخت و هوا قرار گیرد و در شرایط متفاوت حاکم بر مسئله، محل تشکیل این صفحه تغییر نکند؛ بدین ترتیب نتایج تحلیل حساسیت در این صفحه که مستقل از محل تشکیل صفحه سکون هستند، بررسی می‌شوند [3, 9, 25, 26].

از آنجا که سینتیک شیمیایی GRI-Mech 3.0، نتایج بسیار خوبی در شبیه‌سازی شعله نفوذی جریان متقابل تحت رژیم‌های مختلف احتراقی فراهم کرده است [27, 28]، از این رو در محاسبات شیمیایی مطالعه حاضر از این مکانیسم استفاده شده است. مطابق با مطالعات مختلف انجام شده با استفاده از حلگر شعله نفوذی جریان متقابل تحت رژیم‌های مختلف احتراقی، از مدل نازک نوری<sup>1</sup> جهت محاسبه ترم چشمه تشعشعی در معادله انرژی استفاده شده است [29-31]. برای گسسته‌سازی عبارات جابه‌جایی و نفوذ به ترتیب از تقریب مرتبه دوم آپویند استفاده شده است. استفاده از این روش منجر به جلوگیری از ایجاد نفوذ عددی<sup>2</sup> در حل گردیده و دقت بالاتری را نسبت به روش گسسته‌سازی آپویند مرتبه اول فراهم می‌آورد.

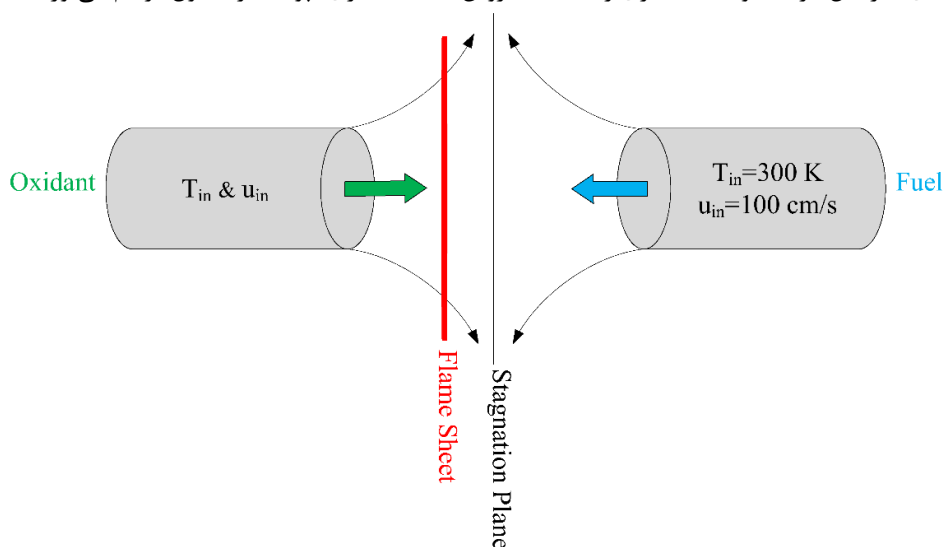


Figure 2- Geometry and boundary conditions of counterflow diffusion flame

شکل 2- هندسه و شرایط مرزی شعله نفوذی جریان متقابل

1. Optically Thin Model  
2. Numerical Diffusion

همان گونه که پیش از این بیان شد، به منظور تحلیل نتایج عددی، از محاسبات شیمیایی حلگر شعله نفوذی جریان متقابل که قابلیت استفاده برای رژیم‌های احتراق معمولی، دما بالا و بدون شعله را دارد، استفاده شده است [3, 16]. یکی از قابلیت‌های این حلگر، تحلیل حساسیت واکنش‌های شیمیایی به عنوان یکی از ابزارهای کیفی جهت تعیین وابستگی حل به پارامترهای مختلف است. متداول‌ترین روش تحلیل حساسیت، آنالیز مرتبه اول کسر گونه است که در آن صرف‌نظر از هر گونه غیرخطی بودن مسئله، مجموعه‌ای از معادلات دیفرانسیل خطی که یک ماتریس تشکیل می‌دهند، مورد استفاده قرار می‌گیرند. در محاسبه ضرایب حساسیت، بردار معادلات حاکم به صورت معادله (1) هستند.

$$F(\varphi(\alpha), \alpha) = 0 \quad (1)$$

در معادله فوق  $\varphi$  بیانگر متغیرهای حل و  $\alpha$  بیانگر فاکتور پیش‌نمایی  $A$  در جمله نرخ واکنش آرنیوس هستند. با مشتق‌گیری از معادله (1)، ماتریس ضرایب حساسیت حاصل شده که فرم جدید آن به صورت معادله (2) خواهد بود:

$$\frac{\partial F}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial \alpha} + \frac{\partial F}{\partial \alpha} = 0 \quad (2)$$

$\frac{\partial F}{\partial \varphi}$  ماتریس ژاکوبین معادلات حاکم بر حلگر و  $\frac{\partial F}{\partial \alpha}$  ماتریس مشتق‌های جزئی نسبت به متغیرهای حلگر شعله نفوذی جریان متقابل است. ستون‌های ماتریس تشکیل شده بیانگر وابستگی بردار  $F$  به هر پارامتر اند.  $\frac{\partial \varphi}{\partial \alpha}$  ماتریس ضرایب حساسیت است که در آن تاثیر پارامترهای مختلف هم‌چون دما و کسر گونه‌ها بر روی مسئله سنجیده می‌شود. محاسبه ضرایب حساسیت با توجه به محاسبه مشتق‌های جزئی مشابه با محاسبه ژاکوبین از روش نیوتون اصلاح شده و همچنین براساس نرخ واکنش‌های مختلف موجود در سینتیک GRI-Mech3.0 انجام می‌شود.

### شرایط حاکم بر شبیه‌سازی عددی و محاسبات شیمیایی

جدول 3، شرایط حاکم بر شبیه‌سازی عددی کوره احتراق غیرپیش‌آمیخته و محاسبات شیمیایی به کمک حلگر شعله نفوذی جریان متقابل را نشان می‌دهد. شبیه‌سازی‌های عددی برای سه حالت مختلف شرایط حرارتی دیواره کوره و همچنین سه ترکیب اکسنده که منجر به احتراق سوخت-هوا ( $Y_{CO_2}=0\%$ )، اکسیژن غنی ( $Y_{CO_2}=50\%$ ) و سوخت-اکسیژن ( $Y_{CO_2}=77\%$ ) می‌شود، انجام شده است. محاسبات شیمیایی ارائه شده در جدول 3 به منظور بررسی اثرات شیمیایی و تحلیل حساسیت به علت تغییر شرایط حرارتی دیواره کوره و ترکیب اکسنده انجام شده است، در حالی که برای دستیابی به نقشه رژیم‌های مختلف احتراقی محاسبات به صورت گسترده انجام شده تا مرز میان رژیم‌ها به صورت قابل قبولی تعیین شود.

جدول 3- شرایط حاکم بر شبیه‌سازی‌های عددی و محاسبات شیمیایی

Table 3- Conditions of numerical simulations and chemical calculations

No.	Wall Thermal Condition	Oxidant Mass Fraction (%)	No.	Heat Loss (cal)	Oxidant Mass Fraction (%)
1	$T_w=1400$ K	$Y_{N_2}=77\%$ و $Y_{CO_2}=0\%$ , $Y_{O_2}=23\%$	1	0	$Y_{N_2}=85\%$ و $Y_{CO_2}=0\%$ , $Y_{O_2}=15\%$
2	$T_w=1600$ K	$Y_{N_2}=77\%$ و $Y_{CO_2}=0\%$ , $Y_{O_2}=23\%$	2	2.5	$Y_{N_2}=85\%$ و $Y_{CO_2}=0\%$ , $Y_{O_2}=15\%$
3	Insulation	$Y_{N_2}=77\%$ و $Y_{CO_2}=0\%$ , $Y_{O_2}=23\%$	3	5	$Y_{N_2}=85\%$ و $Y_{CO_2}=0\%$ , $Y_{O_2}=15\%$
4	$T_w=1400$ K	$Y_{N_2}=27\%$ و $Y_{CO_2}=50\%$ , $Y_{O_2}=23\%$	4	0	$Y_{N_2}=35\%$ و $Y_{CO_2}=50\%$ , $Y_{O_2}=15\%$
5	$T_w=1600$ K	$Y_{N_2}=27\%$ و $Y_{CO_2}=50\%$ , $Y_{O_2}=23\%$	5	2.5	$Y_{N_2}=35\%$ و $Y_{CO_2}=50\%$ , $Y_{O_2}=15\%$
6	Insulation	$Y_{N_2}=27\%$ و $Y_{CO_2}=50\%$ , $Y_{O_2}=23\%$	6	5	$Y_{N_2}=35\%$ و $Y_{CO_2}=50\%$ , $Y_{O_2}=15\%$
7	$T_w=1400$ K	$Y_{N_2}=1\%$ و $Y_{CO_2}=77\%$ , $Y_{O_2}=22\%$	7	0	$Y_{N_2}=8\%$ و $Y_{CO_2}=77\%$ , $Y_{O_2}=15\%$
8	$T_w=1600$ K	$Y_{N_2}=1\%$ و $Y_{CO_2}=77\%$ , $Y_{O_2}=22\%$	8	2.5	$Y_{N_2}=8\%$ و $Y_{CO_2}=77\%$ , $Y_{O_2}=15\%$
9	Insulation	$Y_{N_2}=1\%$ و $Y_{CO_2}=77\%$ , $Y_{O_2}=22\%$	9	5	$Y_{N_2}=8\%$ و $Y_{CO_2}=77\%$ , $Y_{O_2}=15\%$

## نتایج

در این قسمت پس از اعتبارسنجی حلگرهای عددی و محاسبات شیمیایی به ارائه نتایج حاصل از بررسی تاثیر شرایط حرارتی دمای دیواره کوره بر ساختار شعله و محدوده تشکیل رژیم‌های مختلف احتراقی پرداخته می‌شود. در تعیین رژیم‌های احتراقی از معیارهای در نظر گرفته شده توسط کوالیر [6]، دی‌جوانون [7-9] و چئونگ [32] استفاده شده است. مطابق با معیارهای در نظر گرفته شده، رژیم‌های مختلف احتراقی به صورت جدول 4 دسته‌بندی می‌شوند. در این جدول  $T_{in}$  بیانگر دمای ورودی اکسنده،  $T_{max}$  بیشینه دمای حاصل از فرایند احتراق و  $\Delta T$  نشان دهنده اختلاف میان بیشینه دمای فرآیند احتراق و دمای ورودی اکسنده است. همچنین مطابق با معیار چئونگ و دی‌جوانون، در رژیم‌های احتراقی دما بالا و بدون شعله امکان تشکیل ناحیه با نرخ آزادسازی حرارت منفی وجود دارد، در حالی که در احتراق بدون شعله نرخ آزادسازی برای سوخت متان همواره مقداری مثبت داشته و در ناحیه بدون احتراق میزان حرارت آزاد شده ناشی از واکنش‌های شیمیایی برابر با صفر است.

جدول 4- معیارهای در نظر گرفته شده برای دسته‌بندی رژیم‌های احتراقی

Table 4- Considered criteria for categories of combustion regimes

Combustion Regime	Thermal Criteria for Combustion Regime Identification	Heat Release Rate (HRR) Criteria for Combustion Regime Identification
No Combustion (NC)	$\Delta T < T_{in} < T_{ai}$	HRR=0
Traditional Regime (TR)	$T_{in} < T_{ai} < \Delta T$	HRR>0 or HRR<0
High Temperature Regime (HTR)	$T_{ai} < \Delta T$ & $T_{ai} < T_{in}$	HRR>0 or HRR<0
Flameless Regime (FR)	$\Delta T < T_{ai} < T_{in}$	HRR>0

### اعتبارسنجی کوره احتراق غیرپیش‌آمیخته

در شکل 3 با استفاده از مقایسه میان مقادیر اندازه‌گیری شده دما و کسر حجمی خشک گونه‌های اکسیژن و دی‌اکسید کربن با نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های عددی به اعتبارسنجی حلگر و همچنین مدل‌های انتخاب شده برای تقریب عبارات مختلف معادلات بقا پرداخته شده است. نتایج برای توزیع شعاعی سه کمیت بیان شده در فواصل محوری 30، 150 و 270 میلی‌متری از ابتدای محفظه احتراق غیرپیش‌آمیخته مقایسه شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های عددی تطابق خوبی با داده‌های تجربی به‌ویژه در فواصل محوری دورتر نسبت به ناحیه ورودی (فواصل محوری 150 و 270 میلی‌متری) داشته و خطای متوسط برای هر سه کمیت دما، کسر حجمی خشک گونه‌های اکسیژن و دی‌اکسید کربن کمتر از 7 درصد است. علت خطای بالاتر ایجاد شده در فاصله محوری 30 میلی‌متر نیز مربوط به تأثیرپذیری از جریان ورودی سرعت بالا است که در آن خطای ناشی از مدل‌سازی آشفستگی وجود داشته و منجر به اختلاف میان نتایج حل عددی با مقادیر حاصل از مطالعه تجربی شده است (ذکر این نکته لازم است که خطای اندازه‌گیری‌ها و عدم قطعیت نتایج تجربی برای دما و کسر حجمی خشک گونه‌ها 5 درصد گزارش شده است [20]). با توجه به نتایج به‌دست‌آمده، حلگر عددی و مدل‌سازی‌های انجام شده دقت مناسبی داشته که می‌توان از آن‌ها به‌منظور حل عددی کوره احتراق غیرپیش‌آمیخته استفاده کرد.



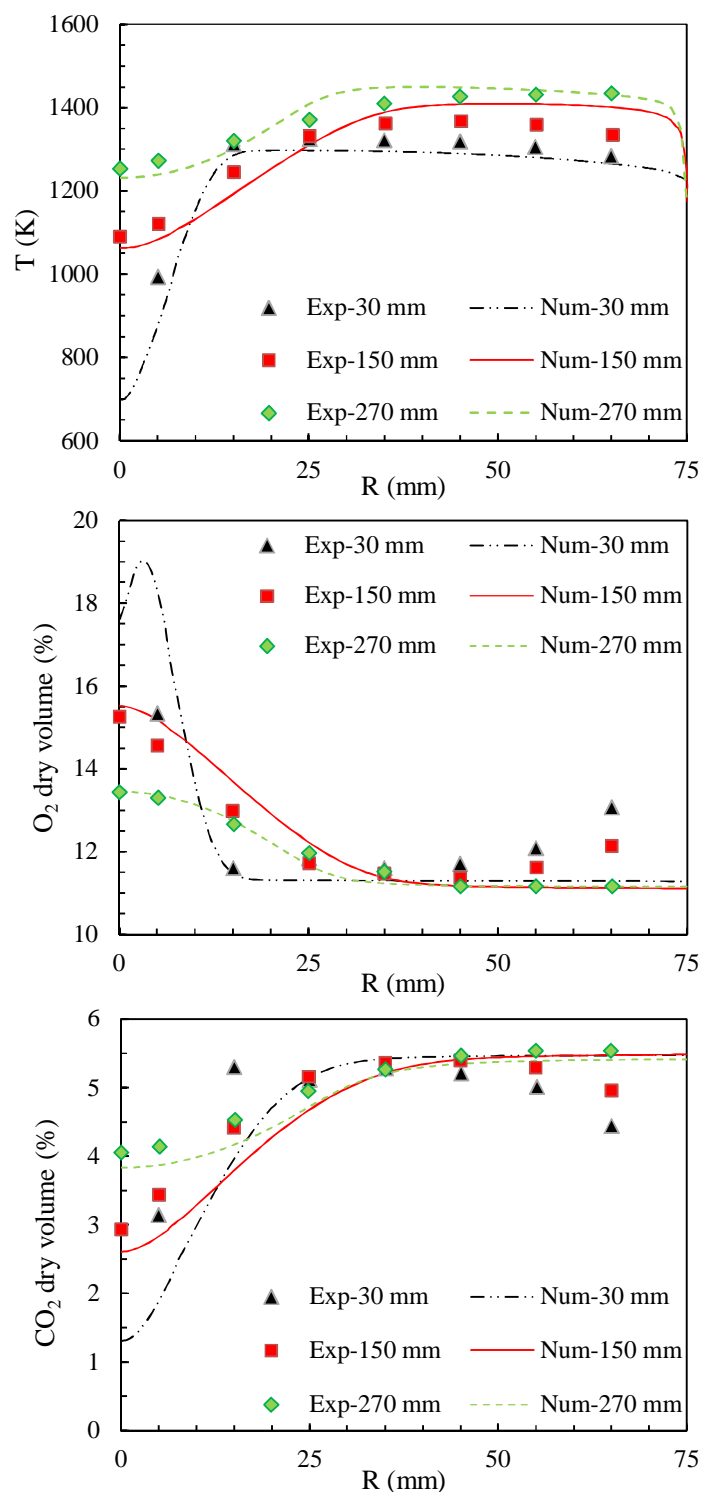


Figure 3- Comparison of experimental and numerical data of temperature and dry volume fractions of O<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> at different axial distances

شکل 3- مقایسه داده‌های تجربی و عددی دما و کسر حجمی خشک گونه‌های اکسیژن و دی‌اکسید کربن در فواصل محوری مختلف

### اعتبارسنجی شعله نفوذی جریان متقابل

مطالعه تجربی چنگ و همکاران [33] به منظور اعتبارسنجی حلگر محاسباتی شعله نفوذی جریان متقابل و سینتیک شیمیایی استفاده شده است. در این مطالعه فاصله میان نازل‌های سوخت و هوا 1/2 سانتی‌متر در نظر گرفته شده است. سرعت جریان سوخت (که مخلوطی از متان و نیتروژن است) مشابه با سرعت جریان اکسنده (که مخلوطی با کسر مولی نیتروژن و اکسیژن 30 و 70 درصد است) بوده و برابر با 19 سانتی‌متر بر ثانیه است. سایر تنظیمات مربوط به حلگر و نحوه گسسته‌سازی ترم‌های مختلف، مشابه با شرایط توضیح داده شده برای شعله نفوذی جریان متقابل در قسمت قبل است. همچنین با توجه به مطالعات پیشین [34, 35] و دقت بالای سینتیک GRI-Mech3.0 در محاسبات شیمیایی مربوط به رژیم‌های احتراقی معمولی، دما بالا و بدون شعله از این سینتیک شیمیایی برای انجام محاسبات حلگر شعله نفوذی جریان متقابل استفاده شده است. مقایسه میان نتایج تجربی و محاسبات سینتیکی مربوط به دما و کسر مولی گونه‌های  $H_2O$ ،  $O_2$ ،  $CO_2$ ،  $CH_4$  در شکل 4 نشان داده شده است. نتایج حاصل از محاسبات سینتیکی با استفاده از مکانیسم شیمیایی GRI-Mech3.0 تطابق بسیار خوبی با اندازه‌گیری‌های تجربی داشته که بیانگر معتبر بودن حلگر و سینتیک شیمیایی جهت انجام محاسبات شیمیایی است.

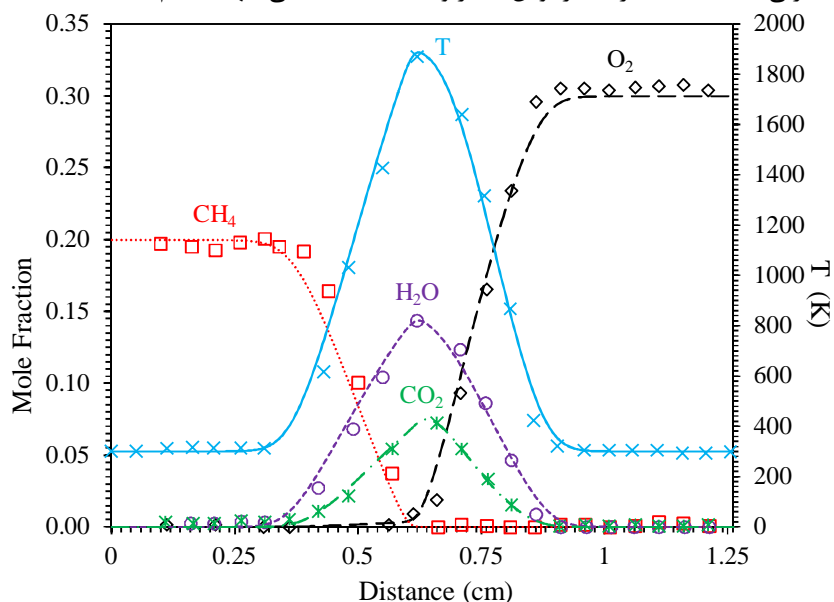


Figure 4- Validation of solver and chemical mechanism in the calculation with counterflow diffusion flow solver

شکل 4- اعتبارسنجی حلگر و سینتیک شیمیایی محاسبات حلگر شعله نفوذی جریان متقابل

### تأثیر شرایط حرارتی دیواره و ترکیب اکسنده بر ساختار شعله

شکل 5 نشان دهنده کانتور تغییرات دما تحت شرایط مختلف حرارتی دیواره کوره در مقادیر تزریق 0، 50 و 77 درصدی دی‌اکسید کربن است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با دور شدن از شرایط عایق حرارتی (کاهش دمای دیواره) و همچنین افزایش میزان  $CO_2$  موجود در اکسنده از میزان بیشینه دمای فرایند احتراق به صورت قابل توجهی کاسته می‌شود. در شرایط کاهش دمای دیواره، اتلاف حرارتی منجر به کاهش دمای بیشینه گازها شده، در حالی که برای تزریق مقادیر مختلف دی‌اکسید کربن درون اکسنده، تفاوت‌های فیزیکی (به ویژه ظرفیت حرارتی و خواص تشعشعی) و شیمیایی (حضور فعال تر  $CO_2$  در واکنش‌های شیمیایی نسبت به  $N_2$ ) منجر به کاهش بیشینه دما می‌شود.

نکته دیگری که در کانتور تغییرات دما مشاهده می‌شود، افزایش طول ناحیه دما پایین ورودی به درون کوره است. این موضوع نیز تحت تاثیر تغییر ترکیب اکسندة و شرایط حرارتی دیواره به صورت قابل توجهی تغییر می‌کند. کاهش طول ناحیه دما پایین به‌طور عمده مربوط به تاخیر در اشتعال می‌شود. با افزایش تزریق دی‌اکسید کربن درون اکسندة تاخیر در فرایند اشتعال و در نتیجه وقوع واکنش‌های شیمیایی به صورت قابل توجهی افزایش می‌یابد که علت آن اثرات فیزیکی متفاوت دی‌اکسید کربن نسبت به نیتروژن به‌ویژه ظرفیت حرارتی بالاتر آن و اثرات شیمیایی حضور  $CO_2$  در واکنش‌های شیمیایی است [24, 36, 37].

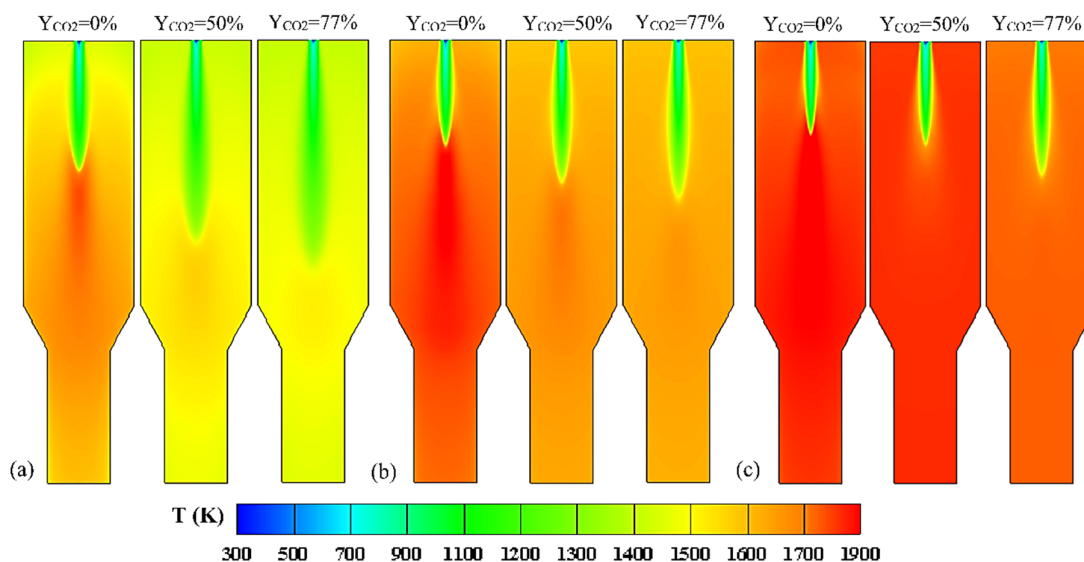


Figure 5- Temperature variations contour for different oxidizer compositions for wall: a) with temperature 1400 K, b) with temperature 1600 K and c) insulation wall

شکل 5- کانتور تغییرات دما برای ترکیب‌های مختلف اکسندة برای دیواره: (a) با دمای 1400 کلوین، (b) با دمای 1600 کلوین و (c) دیواره عایق

شکل 6، خطوط جریان گازهای داغ احتراقی درون کوره احتراق غیرپیش‌آمیخته را نشان می‌دهد. همان‌گونه که پیشتر نیز بیان شد، عامل اصلی تشکیل رژیم‌های احتراقی مختلف در این کوره، بازچرخش شدید محصولات داغ احتراقی است که ضمن کاهش غلظت اکسیژن مخلوط احتراقی (سطح اکسیژن موجود در محصولات احتراقی بسیار پایین است)، پیش از وقوع واکنش‌های شیمیایی منجر به پیش‌گرمایش آن نیز می‌شود. همچنین باید اشاره کرد که تشکیل ناحیه دما بالا در سرتاسر محفظه احتراق در رژیم‌های احتراق معمولی و دما بالا با وجود ناحیه واکنشی محدود و باریک، وجود سطح بالایی از بازچرخش گازهای احتراقی است که به‌علت خروجی نازلی شکل کوره اتفاق می‌افتد.

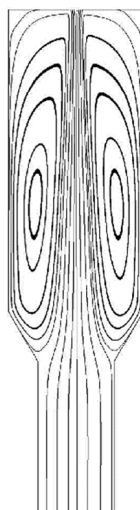


Figure 6- Streamlines in non-premixed combustion furnace

شکل 6- خطوط جریان درون کوره احتراق غیرپیش آمیخته

یکی از گونه‌هایی که به‌طور عمده به‌منظور بررسی ساختار شعله در فرایندهای احتراقی مورد بررسی قرار می‌گیرد، رادیکال هیدروکسیل است. تغییرات رادیکال هیدروکسیل تحت شرایط دیواره با عایق حرارتی و دیواره با دمای ثابت 1400 و 1600 کلوین با استفاده از کسر مولی 0، 50 و 77 درصدی دی‌اکسید کربن درون اکسنده تحت رژیم احتراق معمولی در شکل 7 نشان داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، افزایش دی‌اکسید کربن تزریق شده به درون اکسنده منجر به کاهش قابل توجه بیشینه رادیکال هیدروکسیل تولید شده درون کوره می‌شود. افزون بر این افزایش کسر جرمی  $\text{CO}_2$  درون اکسنده منجر به تشکیل رادیکال هیدروکسیل در فاصله محوری طولانی‌تری نسبت به شرایط استفاده از کسر جرمی  $\text{N}_2$  می‌شود که این موضوع بیانگر تاخیر در فرآیند اشتعال تحت شرایط استفاده از  $\text{CO}_2$  بیشتر است. علت تغییرات اساسی ایجاد شده در ساختار شعله با تغییر در ترکیب اکسنده، تفاوت‌های فیزیکی و شیمیایی  $\text{CO}_2$  با  $\text{N}_2$  است که علاوه بر تغییرات مشاهده شده روی دما و ساختار شعله، بر روی رژیم احتراقی نیز نقش قابل توجهی دارد که در ادامه مطالعه حاضر بر روی آن بحث و بررسی انجام خواهد شد. با توجه به شکل 7، شرایط حرارتی دیواره کوره تاثیر بسیار زیادی روی ساختار شعله و رژیم احتراقی تشکیل شده دارد. در دماهای پایین‌تر دیواره کوره با توجه به وجود تلفات حرارتی از دیواره، میزان بیشینه هیدروکسیل تشکیل شده کاهش یافته و سبب می‌شود تا امکان تشکیل ناحیه واکنشی توزیع شده و حرکت به سمت تشکیل احتراق بدون شعله فراهم شود. با توجه به معیارهای جدول 4، استفاده از کسر جرمی 50 درصدی  $\text{CO}_2$  درون اکسنده تحت شرایط دیواره عایق سبب تشکیل رژیم احتراقی دما بالا می‌شود، در حالی که برای دیواره با دمای 1200 کلوین، رژیم احتراقی بدون شعله تشکیل خواهد شد.

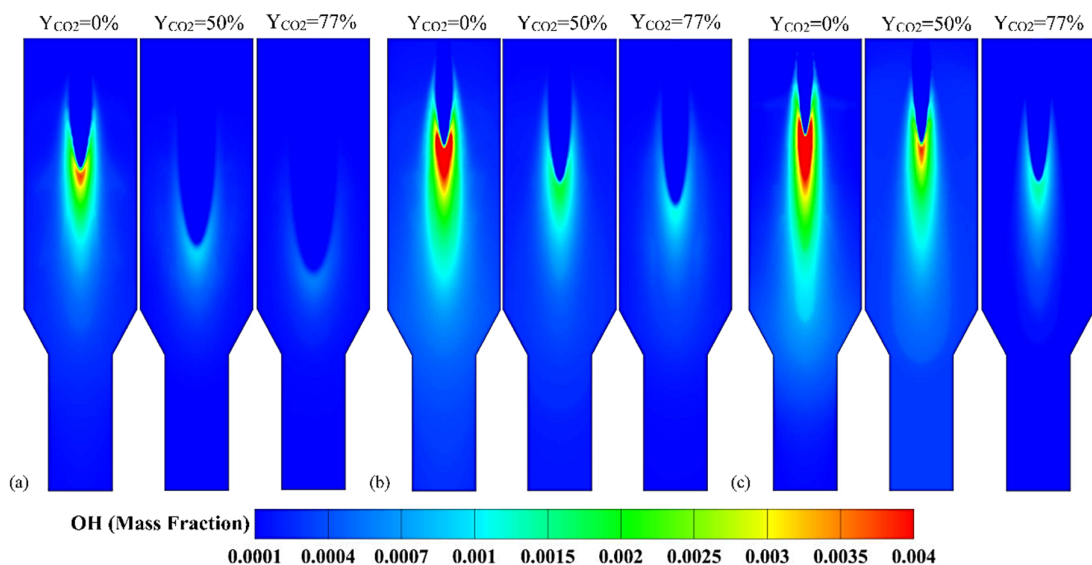


Figure 7- Hydroxyl variation contour under different thermal condition of furnace wall and different mixtures of oxidant compositions, a) wall with temperature 1400 K, b) wall with temperature 1600 K and c) insulation wall

شکل 7- کانتور تغییرات هیدروکسیل تحت شرایط حرارتی مختلف دیواره کوره و ترکیب‌های گوناگون اکسنده، (a) دیواره با دمای 1400 کلوین، (b) دیواره با دمای 1600 کلوین و (c) دیواره عایق

همان‌گونه که پیش از این نیز بیان شد، آنالیز حساسیت گونه هیدروکسیل برای تحلیل نتایج حاصل از بررسی تاثیر ترکیب اکسنده و شرایط حرارتی دیواره بر ساختار شعله استفاده شده است. بدین منظور برای تفکیک اثرات فیزیکی و شیمیایی ناشی از جایگزینی دی‌اکسید کربن با نیتروژن، از گونه مجازی  $FCO_2$  استفاده شده است که خواص فیزیکی کاملاً مشابهی با  $CO_2$  داشته اما در واکنش‌های شیمیایی مشارکت ندارد (این کار مشابه با مطالعات گذشته به منظور تفکیک اثرات فیزیکی و شیمیایی  $CO_2$  انجام شده است [3, 24, 36, 37]). در این شرایط برای گونه مجازی  $FCO_2$  خواص ترمودینامیکی و انتقالی کاملاً مشابه با دی‌اکسید کربن تعریف شده و بدون تغییر در زنجیره واکنش‌ها به‌عنوان گونه‌ای کاملاً خنثی به سینتیک شیمیایی GRI-Mech3.0 افزوده شده است. در جدول 5 شماره واکنش و واکنش‌های حاضر در تحلیل شیمیایی ارائه شده است.

جدول 5- واکنش‌ها و شماره واکنش‌های موثر بر تحلیل حساسیت گونه هیدروکسیل در رژیم‌های مختلف احتراقی

Table 5- Effective reactions and reaction numbers on sensitivity analysis of hydroxyl species at different combustion regimes

Reaction No.	Reaction	Reaction No.	Reaction
R2	$O+H+M \rightleftharpoons OH+M$	R84	$OH+H_2 \rightleftharpoons H+H_2O$
R3	$O+H_2 \rightleftharpoons H+OH$	R85	$2OH+M_2 \rightleftharpoons H_2O_2+M$
R4	$O+HO_2 \rightleftharpoons OH+O_2$	R86	$2OH \rightleftharpoons O+H_2O$
R5	$O+H_2O_2 \rightleftharpoons OH+HO_2$	R87	$OH+HO_2 \rightleftharpoons O_2+H_2O$
R11	$O+CH_4 \rightleftharpoons OH+CH_3$	R92	$OH+CH_2 \rightleftharpoons H+CH_2O$
R13	$O+HCO \rightleftharpoons H+CO_2$	R97	$OH+CH_3 \rightleftharpoons CH_2(s)+H_2O$
R15	$O+CH_2O \rightleftharpoons OH+HCO$	R98	$OH+CH_4 \rightleftharpoons CH_3+H_2O$
R16	$O+CH_2OH \rightleftharpoons OH+CH_2O$	R99	$OH+CO \rightleftharpoons H+CO_2$
R33	$H+O_2+M \rightleftharpoons HO_2+M$	R100	$OH+HCO \rightleftharpoons H_2O+CO$
R35	$H+O_2+H_2O \rightleftharpoons HO_2+H_2O$	R120	$HO_2+CO \rightleftharpoons OH+CH_3O$
R38	$H+O_2 \rightleftharpoons O+OH$	R127	$CH+H_2O \rightleftharpoons H+CH_2O$
R41	$2H+H_2O \rightleftharpoons H_2+H_2O$	R135	$CH_2+O_2 \rightleftharpoons OH+H+CO$
R43	$H+OH+M \rightleftharpoons H_2O+M$	R155	$CH_3+O_2 \rightleftharpoons OH+CH_2O$
R46	$H+HO_2 \rightleftharpoons 2OH$	R167	$O_2+HCO \rightleftharpoons HO_2+CO$
R61	$H+CH_2OH \rightleftharpoons OH+CH_3$	R287	$OH+HO_2 \rightleftharpoons O_2+H_2O$
R62	$H+CH_2OH \rightleftharpoons CH_2(s)+H_2O$	R288	$OH+CH_3 \rightleftharpoons H_2+CH_2O$

شکل 8 تحلیل حساسیت گونه هیدروکسیل را تحت شرایط حرارتی عایق و با اتلاف حرارتی 2/5 کالری بر ثانیه با استفاده از گونه‌های  $CO_2$ ،  $N_2$  و  $FCO_2$  تحت رژیم احتراقی معمولی در محل تشکیل صفحه سکون حلگر شعله نفوذی جریان متقابل نشان می‌دهد. با توجه به شکل 8، واکنش‌های R4، R11 و R86 واکنش‌های اصلی در کاهش تولید رادیکال هیدروکسیل با جایگزینی  $CO_2$  با  $N_2$  در حالت بدون اتلاف حرارتی هستند. در واکنش R4 تفاوت میان خواص فیزیکی و شیمیایی  $CO_2$  نسبت به  $N_2$  منجر به کاهش تولید OH می‌شود که با توجه به شکل 8، سهم تاثیر فیزیکی بسیار بیشتر از تاثیر حضور  $CO_2$  در واکنش‌های شیمیایی است. در واکنش‌های R11 و R86 اثرات فیزیکی منجر به کاهش قابل توجه نرخ تولید OH شده است در حالی که تاثیر شیمیایی منجر به افزایش نرخ تولید رادیکال هیدروکسیل از طریق واکنش‌های یاد شده می‌شود؛ با این حال جایگزینی  $CO_2$  با  $N_2$ ، کاهش نرخ تولید OH از طریق واکنش‌های R11 و R64 را به همراه دارد. ذکر این نکته لازم است که جایگزینی  $CO_2$  با  $N_2$  منجر به کاهش تولید رادیکال هیدروژن از طریق واکنش R41 شده که کاهش تولید این رادیکال عامل مهمی در کاهش نرخ تولید OH است.

با در نظر گرفتن اتلاف حرارتی، مسیره‌های واکنشی تغییر پیدا کرده و واکنش‌های R3، R100، R120 و R135 به‌عنوان واکنش‌های اصلی در کاهش تولید رادیکال هیدروکسیل شناخته می‌شوند. واکنش‌های R3 و R135 به‌دلیل اثرات فیزیکی و شیمیایی (با غالب بودن قابل توجه اثرات فیزیکی) منجر به کاهش تولید OH می‌شوند. با این حال در واکنش‌های R100 و R120 اثرات فیزیکی منجر به کاهش قابل توجه نرخ تولید OH می‌شوند اما حضور  $CO_2$  در واکنش‌ها تاثیری وارونه نسبت به اثرات فیزیکی داشته و به میزان کمی نرخ تولید رادیکال هیدروکسیل را افزایش می‌دهد. واکنش R84 نیز برخلاف چهار واکنش دیگر سبب افزایش مصرف رادیکال OH می‌شود، اما با توجه به اینکه اغلب مسیره‌های واکنشی در جهت کاهش نرخ تولید OH هستند، در حالت کلی نیز میزان هیدروکسیل تولید شده کاهش می‌یابد.

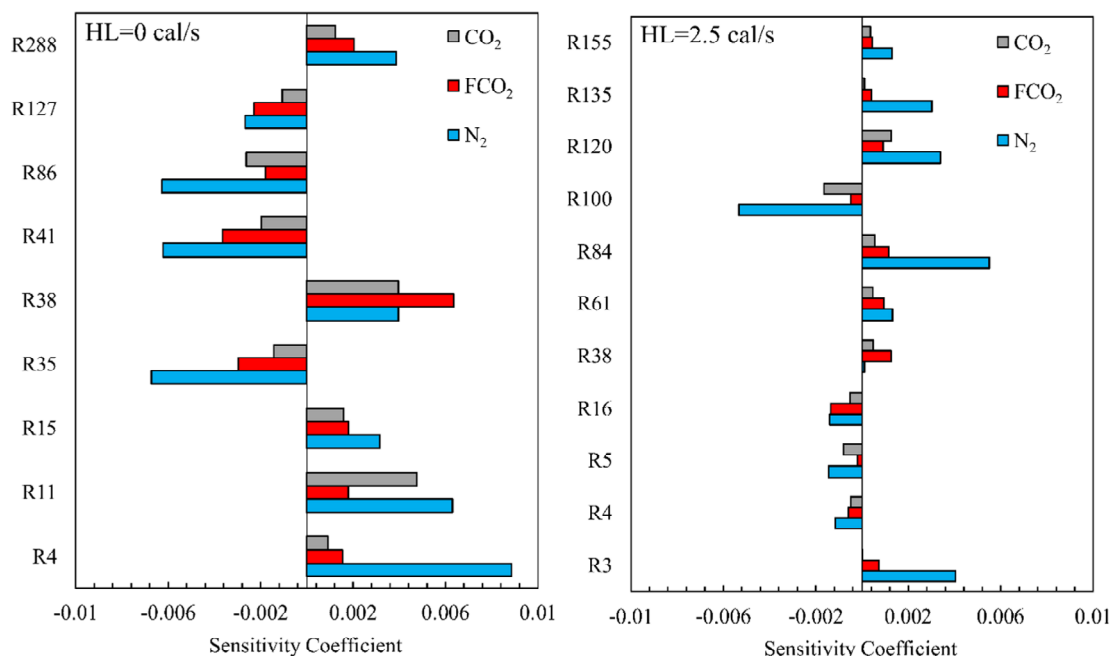


Figure 8- Sensitivity analysis of chemical reactions in different thermal conditions using of  $O_2/CO_2$  and  $O_2/N_2$  mixtures under conventional combustion regime

شکل 8- تحلیل حساسیت شیمیایی واکنش‌ها در شرایط حرارتی مختلف با استفاده از مخلوط‌های  $O_2/CO_2$  و  $O_2/N_2$  تحت رژیم احتراق معمولی

تحلیل حساسیت شیمیایی رادیکال هیدروکسیل تحت رژیم احتراقی بدون شعله با استفاده از گونه‌های  $\text{CO}_2$ ،  $\text{N}_2$  و  $\text{FCO}_2$  تحت شرایط حرارتی متفاوت در شکل 9 نشان داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، واکنش‌های R87، R61، R38 و R287 مسیرهای اصلی در تولید رادیکال هیدروکسیل اند که این واکنش‌ها تحت تاثیر تفاوت‌های فیزیکی و شیمیایی  $\text{CO}_2$  با  $\text{N}_2$  منجر به کاهش در تولید رادیکال هیدروکسیل در شرایط استفاده از  $\text{CO}_2$  در ترکیب اکسنده می‌شوند. در این واکنش‌ها عامل اصلی که سبب کاهش نرخ تولید رادیکال هیدروکسیل می‌شود، تفاوت ناشی از حضور فعال‌تر  $\text{CO}_2$  در واکنش‌های شیمیایی است که این نتیجه برخلاف شرایط احتراقی تحت رژیم معمولی است که در آن تفاوت‌های فیزیکی نقش اصلی را در کاهش نرخ تولید رادیکال هیدروکسیل ایفا می‌کردند. تحت رژیم بدون شعله بدون تلفات حرارتی، واکنش‌های R61، R38 و R287 کاهش تولید هیدروکسیل را به میزان کمی از طریق تفاوت‌های فیزیکی ترکیب اکسنده نشان می‌دهند، در حالی که تفاوت‌های شیمیایی نقش قابل توجهی در کاهش تولید هیدروکسیل دارند. تحلیل حساسیت واکنش R87 نیز بیانگر افزایش کم OH تولید شده به علت تفاوت‌های فیزیکی است، در حالی که اثرات شیمیایی منجر به کاهش قابل توجه رادیکال هیدروکسیل تولید شده می‌شود. مشابه با رژیم معمولی، تحت رژیم احتراق بدون شعله نیز با وجود اتلاف حرارتی از واکنشگاه، مسیرهای واکنشی تغییر قابل توجهی می‌کنند که عامل اصلی آن کاهش دمای بیشینه است. تحت شرایط با تلفات حرارتی، نرخ تشکیل رادیکال هیدروکسیل به صورت عمده از طریق واکنش‌های R38 و R43 تحت تاثیر قرار می‌گیرد. در هر دو واکنش اثرات شیمیایی جایگزینی دی‌اکسید کربن با نیتروژن نقش اساسی و اصلی را ایفا کرده و اثرات فیزیکی به میزان کمی در کاهش تولید OH نقش ایفا می‌کنند. در هر دو حالت حرارتی بررسی شده تحت رژیم بدون شعله، دو واکنش R33 و R35 در مسیر مصرف رادیکال هیدروژن به‌عنوان یکی از گونه‌های اصلی جهت تولید رادیکال هیدروکسیل پیش رفته و در جهت کاهش تولید رادیکال هیدروکسیل نقش اساسی ایفا می‌کنند.

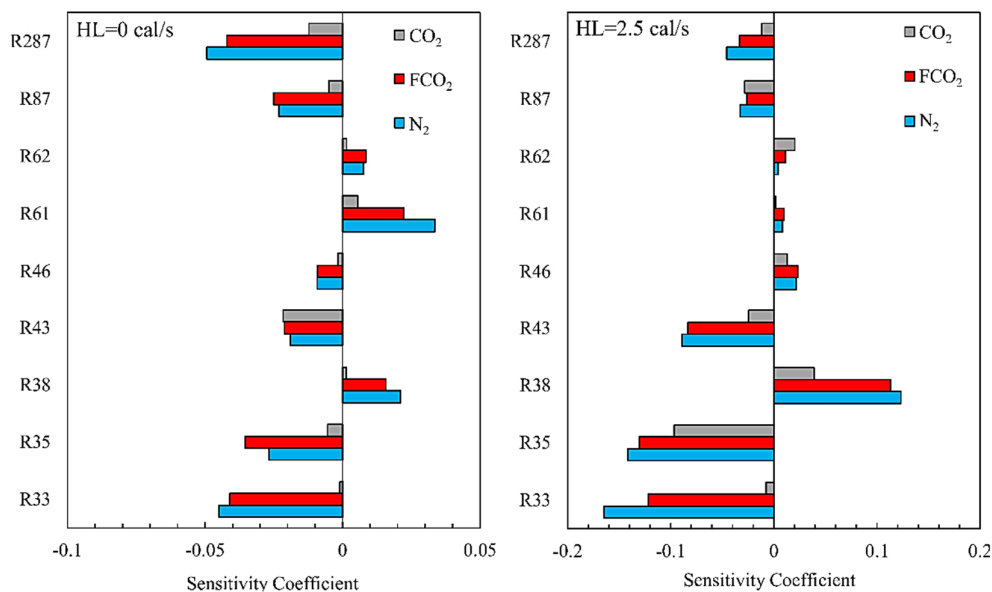


Figure 9- Sensitivity analysis of chemical reactions under flameless regime using of oxidizer compositions  $\text{O}_2/\text{CO}_2$  and  $\text{O}_2/\text{N}_2$  at condition with heat loss and without heat loss

شکل 9- تحلیل حساسیت واکنش‌های شیمیایی تحت رژیم بدون شعله با استفاده از ترکیب‌های اکسنده  $\text{O}_2/\text{N}_2$  و  $\text{O}_2/\text{CO}_2$  در شرایط همراه با اتلاف حرارتی و بدون اتلاف حرارت

آنالیز حساسیت شیمیایی تحت رژیم دما بالا با استفاده از گونه‌های  $N_2$ ،  $CO_2$  و  $FCO_2$  برای دو شرایط مختلف حرارتی در شکل 10 نشان داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود تحت شرایط بدون اتلاف حرارتی، واکنش‌های R2، R97، R98، R99 و R287 واکنش‌های اصلی در تولید و مصرف رادیکال هیدروکسیل اند. در رژیم احتراق دما بالا با جاگزینی  $CO_2$  با  $N_2$  برخلاف دو رژیم احتراق معمولی و بدون شعله، هر دو عامل فیزیکی و شیمیایی در واکنش‌های مختلف منجر به کاهش نرخ تولید OH می‌شوند. در واکنش‌های R2، R97، R99 و تاثیر شیمیایی حضور فعال تر  $CO_2$  در واکنش‌های شیمیایی عامل کاهش نرخ تولید هیدروکسیل است در حالی که در واکنش‌های R98 و R287 اثرات فیزیکی به‌ویژه ظرفیت حرارتی و خواص تشعشعی متفاوت  $CO_2$  نسبت به  $N_2$  عامل اصلی در کاهش نرخ تولید هیدروکسیل است.

وجود اتلاف حرارتی تحت رژیم احتراقی دما بالا تغییرات کمتری نسبت به دو رژیم دیگر در مسیرهای واکنشی ایجاد می‌کند که این موضوع به علت دمای بسیار بالای بیشینه فرایند احتراق است که وجود اتلاف حرارتی تحت ترکیب اکسنده یکسان منجر به کاهش کمتری در بیشینه دمای فرایند احتراق می‌شود. با این حال تحت این رژیم نیز می‌توان اثر تغییر در مسیرهای واکنشی را مشاهده کرد. تحت این شرایط واکنش‌های R2، R3، R86، R99 و R287 مسئول اصلی در تولید و مصرف گونه هیدروکسیل می‌باشند. در واکنش‌های R2، R3 و R287 اثرات فیزیکی و شیمیایی سهم تقریباً یکسانی در کاهش نرخ تولید OH دارند، در حالی که در واکنش‌های R86 و R99 عامل اصلی کاهش نرخ تولید هیدروکسیل، اثرات فیزیکی ناشی از تغییر اکسنده است.

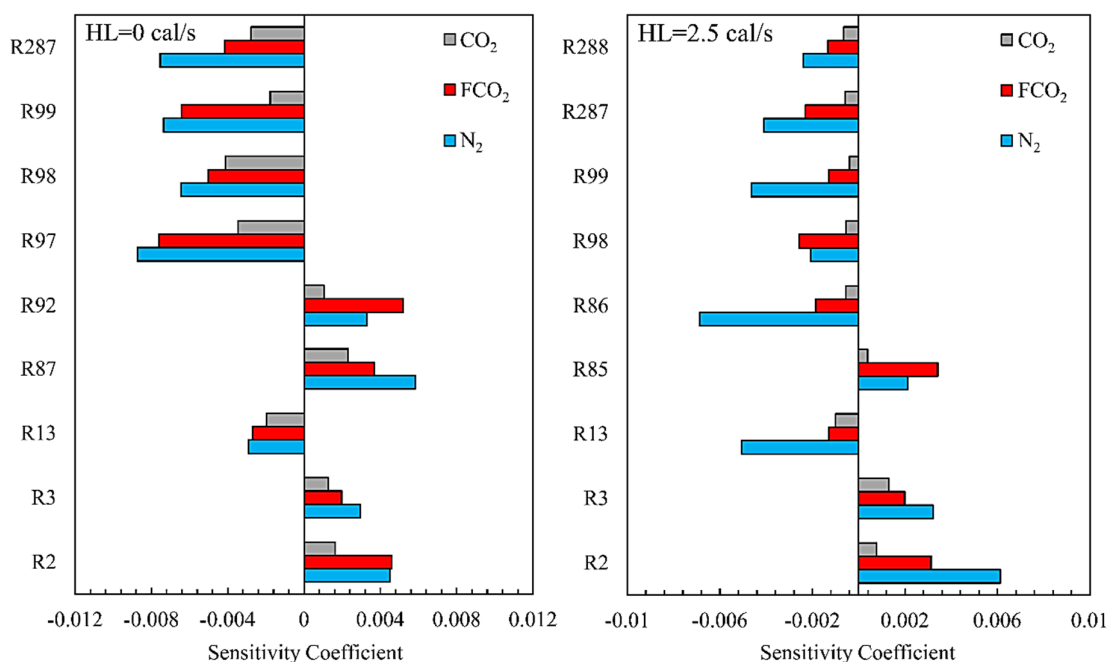


Figure 10- Sensitivity analysis of chemical reactions for different oxidizer composition and thermal conditions under high temperature regime

شکل 10- تحلیل حساسیت واکنش‌های شیمیایی برای ترکیب‌های اکسنده و شرایط حرارتی گوناگون تحت رژیم دما بالا

### نقشه رژیم‌های احتراقی و آزادسازی حرارت در شرایط حرارتی دیواره و ترکیب اکسنده مختلف

در شکل 11 با استفاده از محاسبات حلگر شعله نفوذی جریان متقابل، تاثیر شرایط حرارتی (در نظر گرفتن شرایط عایق حرارتی و استفاده از 2/5 کالری اتلاف حرارتی از فرایند احتراق) و ترکیب اکسنده بر محدوده تشکیل رژیم‌های مختلف احتراقی مطالعه



شده است. محدوده رژیم‌های احتراقی معمولی، دما بالا و بدون شعله با توجه به معیارهای جدول 4 تعیین شده‌اند. همان‌گونه که در شکل 11 مشاهده می‌شود، وجود اتلاف حرارتی منجر به افزایش دمای خوداشتعالی مخلوط احتراقی به‌عنوان یکی از متغیرهای اصلی در تعیین رژیم‌های مختلف می‌شود (با توجه به معیارهای جدول 4، خط مرزی میان رژیم‌های معمولی با دما بالا و بدون شعله بیانگر دمای خوداشتعالی در شرایط مختلف دمای ورودی و ترکیب اکسنده است). این موضوع در اکسنده نیتروژن نسبت به دی‌اکسید کربن مشهودتر است که علت اصلی آن تغییر در مسیرهای واکنشی با تغییر ترکیب اکسنده و همچنین تفاوت‌های فیزیکی  $\text{CO}_2$  با  $\text{N}_2$  است. از طرفی با افزایش اتلاف حرارتی و همچنین تغییر محیط اکسنده از  $\text{N}_2$  به  $\text{CO}_2$  محدوده بدون انجام واکنش‌های شیمیایی گسترش پیدا می‌کند که علت آن جذب بیشتر حرارت به وسیله دی‌اکسید کربن است که سبب می‌شود تا نیاز به کسر جرمی اکسیژن بیشتری در یک دمای مشابه، نسبت به شرایط استفاده از نیتروژن به عنوان اکسنده جهت آغاز واکنش‌های شیمیایی باشد.

در شکل 11 مشاهده می‌شود که کاهش کسر مولی اکسیژن درون اکسنده منجر به افزایش محدوده تشکیل احتراق بدون شعله می‌شود که این موضوع با فیزیک این رژیم احتراقی که اسلترام به کاهش موضعی غلظت اکسیژن در ناحیه واکنشی دارد، منطبق است. در غلظت‌های بالای اکسیژن، احتراق بدون شعله در دماهای بسیار بالای اکسنده ورودی تشکیل می‌شود. این موضوع به‌علت بیشینه دمایی است که با استفاده از سوخت متان می‌توان حاصل کرد. در واقع زمانی که دمای اکسنده از مقدار مشخصی بیشتر می‌شود، بیشینه دمای فرایند احتراق به میزان بسیار کمتری نسبت به دمای اکسنده ورودی افزایش پیدا کرده و سبب می‌شود تا معیار در نظر گرفته شده توسط دی‌جوانون و کوالیر برای تشکیل رژیم بدون شعله برآورده گردد. از طرفی وجود اتلاف حرارتی و استفاده از دی‌اکسید کربن به جای نیتروژن درون اکسنده سبب می‌شود تا در مقادیر اکسیژن بالاتر امکان تشکیل احتراق بدون شعله وجود داشته باشد. علت این موضوع آن است که با تغییر ترکیب اکسنده از  $\text{N}_2$  به  $\text{CO}_2$ ، با توجه به ظرفیت حرارتی و خواص تشعشعی متفاوت دی‌اکسید کربن با نیتروژن و همچنین شرکت  $\text{CO}_2$  در واکنش‌های تجزیه‌ای، امکان استفاده بیشتر از اکسیژن با توجه به کاهش دمای بیشینه احتراق فراهم شود. در حالت وجود اتلافات حرارتی نیز بیشینه دمای پایین‌تر فرایند احتراق امکان تشکیل رژیم بدون شعله تحت شرایط با کسر مولی اکسیژن بالاتر را فراهم می‌کند.

اختلاف اصلی در نقشه رژیم‌های احتراقی با تغییر ترکیب اکسنده و تغییر شرایط حرارتی، محدوده تشکیل رژیم‌های دما بالا و بدون شعله است. با افزایش اتلاف حرارتی، محدوده تشکیل رژیم بدون شعله به صورت قابل توجهی گسترش پیدا کرده، در حالی که ناحیه تشکیل رژیم دما بالا محدود می‌شود. وجود اتلاف حرارتی از یک سو منجر به کاهش دمای بیشینه احتراق می‌شود و از سوی دیگر امکان دستیابی به رژیم بدون شعله را در مقادیر کسر مولی اکسیژن ورودی بالاتر فراهم می‌آورد (در واقع با استفاده از مقادیر اکسیژن بیشتر تحت شرایط دارای اتلاف حرارتی، می‌توان به دمای بیشینه مشابهی تحت شرایط عایق حرارتی با میزان اکسیژن کمتر ورودی دست یافت). نکته مهمی که دستیابی به رژیم احتراقی بدون شعله را حائز اهمیت می‌کند، میزان آلاینده (به ویژه ناکس) تولید شده و بازدهی حرارتی است. با توجه به کاهش دمای بیشینه در رژیم بدون شعله نسبت به رژیم احتراقی دما بالا، میزان ناکس منتشر شده از این رژیم تحت شرایط یکسان عملکردی، به میزان قابل توجهی کمتر است. دمای بیشینه پایین‌تر که در نتیجه کاهش غلظت اکسیژن موضعی حاصل می‌شود سبب کاهش نرخ تولید ناکس از طریق مکانیسم حرارتی شده و با توجه به نقش ویژه این رژیم در انتشار ناکس، میزان  $\text{NO}_x$  کلی انتشار یافته کاهش می‌یابد. از نظر بازدهی حرارتی نیز در بررسی‌های مختلف تحت شرایط عملکردی یکسان، بازدهی رژیم بدون شعله بیشتر از رژیم دما بالا گزارش شده است [5, 6]. علت این موضوع ایجاد ناحیه واکنشی گسترش یافته، متوسط دمایی بسیار بالاتر و سهم بالای انتقال حرارت تشعشعی در رژیم بدون شعله نسبت به رژیم دما بالا است که در آن واکنش‌های شیمیایی در ناحیه‌ی باریک جبهه شعله به وقوع می‌پیوندند. از این رو می‌توان گفت که فراهم کردن شرایط تشکیل این رژیم احتراقی می‌تواند منجر به تشکیل شرایطی ایده‌آل در تولید انرژی با استفاده از سوخت‌های فسیلی شود (باید اشاره کرد که حصول رژیم بدون شعله با حداقل افت حرارتی سبب

بازدهی حرارتی بسیار بالاتری نسبت به شرایط با افت حرارتی بالاتر می‌شود؛ بنابراین باید در طراحی سیستم‌های احتراقی با توجه به نقشه رژیم‌های احتراقی به سمتی حرکت کرد که افت حرارتی از احتراق کمینه شود.

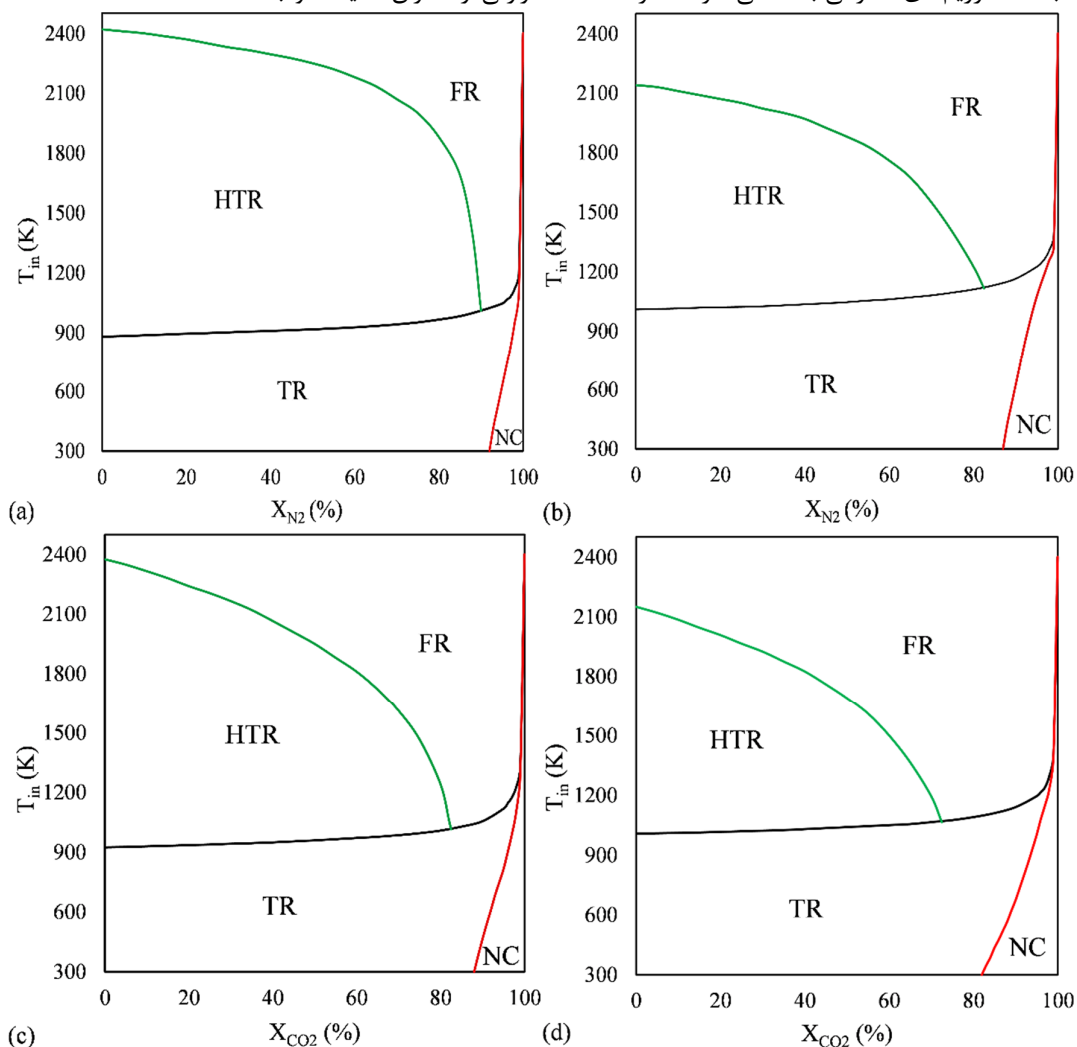


Figure 11- Variation of combustion regimes under different thermal conditions and oxidizer composition; a) without heat loss with oxidizer  $N_2/O_2$ , b) with heat loss with oxidizer  $N_2/O_2$ , c) without heat loss with oxidizer  $CO_2/O_2$  and d) without heat loss with oxidizer  $CO_2/O_2$

شکل 11- تغییرات نقشه رژیم‌های احتراقی تحت شرایط مختلف حرارتی و ترکیب اکسنده؛ (a) بدون اتلاف حرارتی با اکسنده  $N_2/O_2$ ، (b) همراه با اتلاف حرارتی با اکسنده  $N_2/O_2$ ، (c) بدون اتلاف حرارتی با اکسنده  $CO_2/O_2$  و (d) همراه با اتلاف حرارتی با اکسنده  $CO_2/O_2$

### انتشار آلاینده مونوکسید کربن

یکی از مباحث مهم در ارتباط با فرایندهای احتراقی، انتشار آلاینده‌ها است. آلاینده‌های اصلی احتراق گاز طبیعی مونوکسید کربن و ناکس‌اند که در مطالعه حاضر نیز به بحث پیرامون انتشار آلاینده مونوکسید کربن پرداخته شده است. شکل 12 نشان دهنده انتشار آلاینده مونوکسید کربن در خروجی کوره احتراقی غیرپیش‌آمیخته تحت شرایط حرارتی مختلف حاکم بر دیواره و ترکیب‌های مختلف اکسنده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، انتقال به رژیم احتراقی سوخت اکسیژن (استفاده از کسر

جرمی دی‌اکسید کربن (77 درصدی) سبب می‌شود تا میزان انتشار آلاینده مونوکسید کربن به صورت قابل توجهی افزایش یابد که این موضوع مستقل از شرایط حرارتی دیواره کوره است. در شرایط احتراقی اکسیژن غنی (جایگزینی 50 درصد نیتروژن با دی‌اکسید کربن در سمت اکسنده) افزایش انتشار آلاینده مونوکسید کربن به‌ویژه تحت شرایط رژیم احتراق بدون شعله کمتر از شرایط احتراقی سوخت-اکسیژن است که این موضوع می‌تواند مربوط به تغییرات کمتر بی‌شینه دما و همچنین مسیرهای واکنشی تحت این رژیم احتراقی باشد.

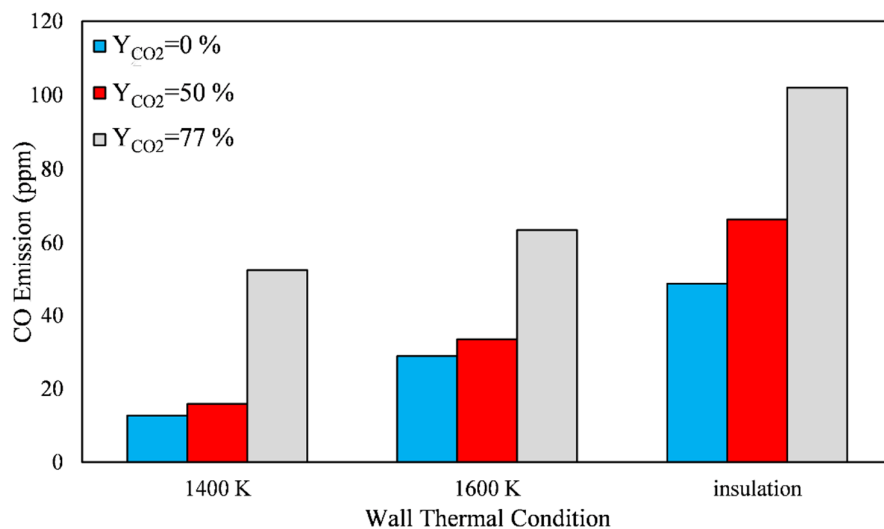


Figure 12- Emission changes of carbon monoxide pollutants in different amounts of carbon dioxide injection and under different wall thermal conditions

شکل 12- تغییرات انتشار آلاینده مونوکسید کربن در مقادیر مختلف تزریق دی‌اکسید کربن و تحت شرایط مختلف حرارتی دیواره

به‌منظور بررسی اثرات فیزیکی و شیمیایی ناشی از تغییرات اکسنده و همچنین مطالعه تاثیر شرایط حرارتی بر انتشار آلاینده مونوکسید کربن، تحلیل حساسیت واکنش‌های شیمیایی در ارتباط با گونه CO در شکل‌های 13، 14 و 15 نشان داده شده است. شکل 13 مربوط به رژیم احتراق معمولی است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، تحت رژیم احتراق معمولی، اثرات فیزیکی جایگزینی  $CO_2$  با  $N_2$  نقش اصلی را در افزایش انتشار مونوکسید کربن ایفا می‌نماید، در حالی که اثرات شیمیایی تأثیری ناچیز داشته و امکان کاهش میزان انتشار مونوکسید کربن را فراهم می‌نماید.

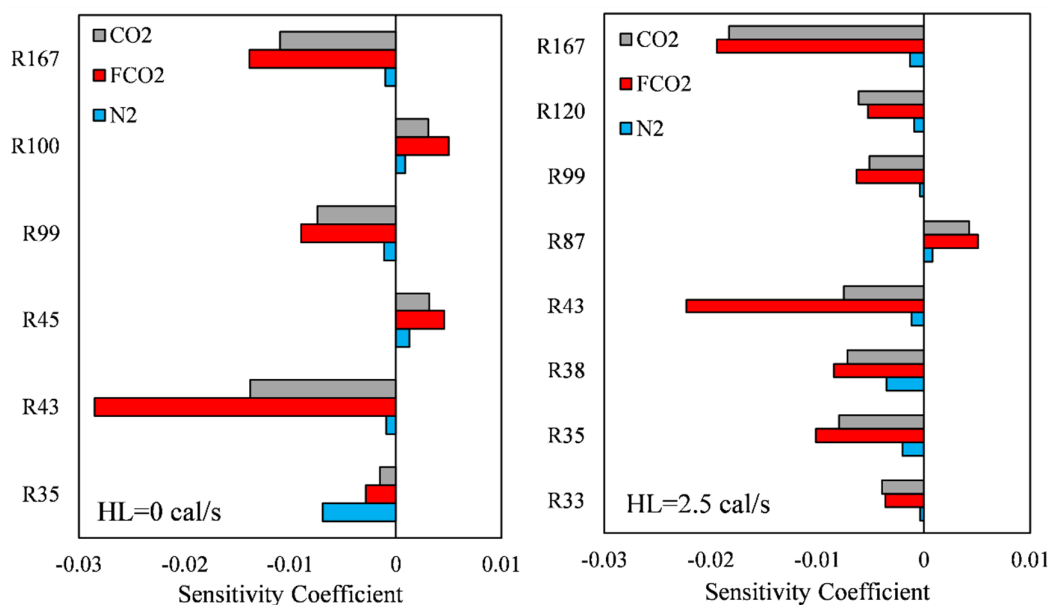


Figure 13- Physical and chemical effects of carbon dioxide injection on carbon monoxide emission in conventional combustion regime under different wall thermal conditions

شکل 13- اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دی اکسید کربن بر انتشار مونوکسید کربن در رژیم احتراق معمولی تحت شرایط حرارتی مختلف دیواره

همچنین از شکل 12 و در رژیم احتراق معمولی می توان مشاهده کرد که در شرایط عایق حرارتی سه واکنش  $OH+CO \rightleftharpoons H+CO_2$ ،  $OH+HCO \rightleftharpoons H_2O+CO$  و  $O_2+HCO \rightleftharpoons HO_2+CO$  عوامل اصلی در افزایش انتشار مونوکسید کربن اند در حالی که وجود اتلاف حرارتی سبب تغییر در مسیر واکنش های شیمیایی شده تا سه واکنش  $OH+CO \rightleftharpoons H+CO_2$ ،  $OH+HCO \rightleftharpoons H_2O+CO$  و  $O_2+HCO \rightleftharpoons HO_2+CO$  عوامل اصلی در تولید و انتشار مونوکسید کربن شوند.

شکل 14، تحلیل حساسیت گونه مونوکسید کربن را تحت تزریق مقادیر مختلف دی اکسید کربن برای رژیم دما بالا نشان می دهد. همان گونه که مشاهده می شود، برای انتشار CO تحت رژیم دما بالا، عوامل فیزیکی و شیمیایی تاثیر قابل توجهی بر تولید این گونه داشته و سبب انتشار آن می شوند. در شرایط عایق حرارتی واکنش های شیمیایی R100 و R99 واکنش های اصلی در تولید و انتشار مونوکسید کربن اند در حالی که در شرایط همراه با اتلافات حرارتی واکنش های R120 و R105، R99، در واکنش R99 تحت شرایط عایق و همراه با اتلاف حرارتی، میزان دی اکسید کربن در دسترس برای شرایط سوخت- اکسیژن بیشتر بوده و سبب می شود تا تولید و انتشار مونوکسید کربن به سبب حضور این گونه در واکنش های شیمیایی بیشتر شود.

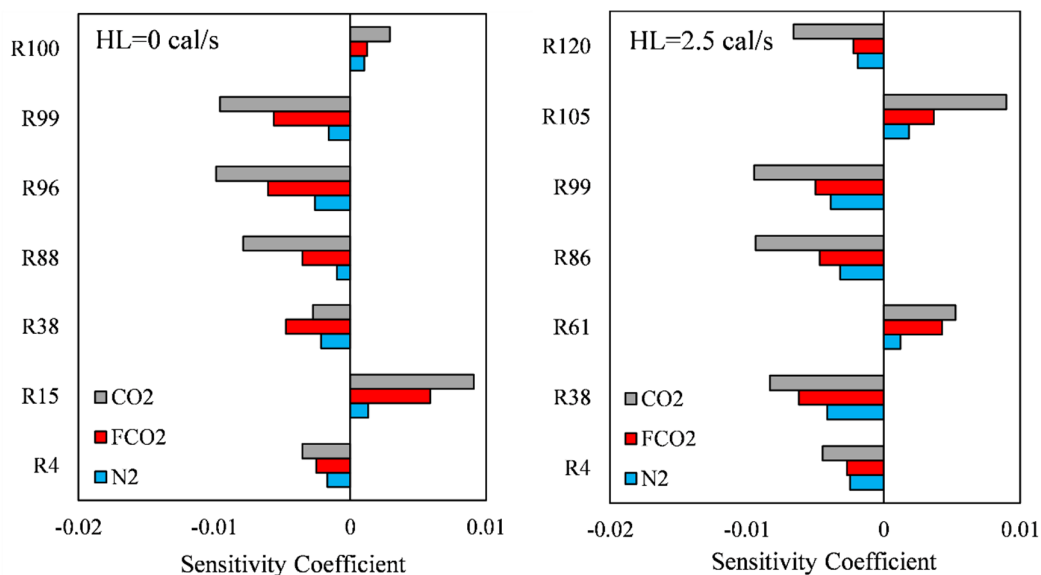


Figure 14- Sensitivity analysis of carbon monoxide pollution under high temperature regime for various oxidant composition

شکل 14- تحلیل حساسیت آلاینده مونوکسید کربن تحت رژیم دما بالا برای ترکیب‌های مختلف اکسنده

تحلیل حساسیت آلاینده CO تحت رژیم بدون شعله برای ترکیب‌های اکسنده مختلف در شکل 15 نشان داده شده است. در رژیم احتراق معمولی دمای بیشینه در ناحیه حل نسبت به دو رژیم دیگر بسیار پایین‌تر بوده و سبب می‌شود تا مسیرهای واکنشی به صورت قابل توجهی دستخوش تغییر شوند. مطابق با شکل 15، تحت شرایط بدون اتلاف حرارتی واکنش‌های اصلی در افزایش انتشار مونوکسید کربن تحت شرایط تزریق CO<sub>2</sub> درون اکسنده‌اند در حالی که تحت شرایط همراه با اتلافات حرارتی واکنش‌های O<sub>2</sub>+HCO⇌HO<sub>2</sub>+CO، OH+CO⇌H+CO<sub>2</sub>، OH+HCO⇌H<sub>2</sub>O+CO و HO<sub>2</sub>+CO⇌OH+CH<sub>3</sub>O عوامل اصلی در افزایش انتشار مونوکسید کربن تحت شرایط تزریق CO<sub>2</sub> درون اکسنده‌اند در حالی که تحت شرایط همراه با اتلافات حرارتی واکنش‌های O<sub>2</sub>+HCO⇌HO<sub>2</sub>+CO، OH+CO⇌H+CO<sub>2</sub>، OH+HCO⇌H<sub>2</sub>O+CO و HCO+H<sub>2</sub>O⇌H+CO+H<sub>2</sub>O واکنش‌هایی هستند که نقش عمده در انتشار و تولید مونوکسید کربن ایفا می‌کنند.

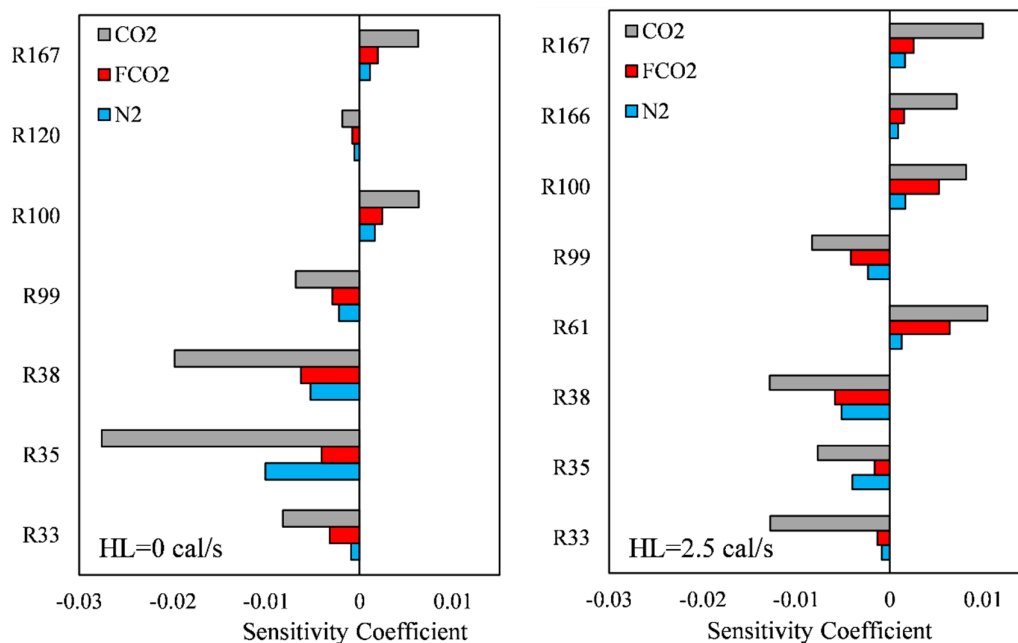


Figure 15- Sensitivity analysis of carbon monoxide species in flameless regime under insulated wall condition and wall with heat loss

شکل 15- تحلیل حساسیت گونه مونوکسید کربن در رژیم بدون شعله تحت شرایط دیواره عایق و دیواره همراه با اتلاف حرارتی

### نتیجه گیری

در مطالعه حاضر با استفاده از شبیه سازی عددی کوره احتراق غیرپیش آمیخته و محاسبات سینتیکی به کمک حلگر شعله نفوذی جریان متقابل، به بررسی تاثیر شرایط حرارتی و ترکیب اکسنده (جایگزینی دی اکسید کربن با نیتروژن) بر ساختار شعله و نقشه رژیم های مختلف احتراقی پرداخته شده است. در شبیه سازی عددی از کوره آزمایشگاهی دانشگاه لیسبون پرتغال با توجه به امکان تشکیل رژیم های مختلف احتراقی در مطالعه تجربی استفاده شده است. در محاسبات سینتیکی نیز شرایط حاکم بر حلگر شعله نفوذی جریان متقابل ابتدا اعتبار سنجی گردیده و سپس با در نظر گرفتن شرایط مختلف شبیه سازی، نقشه رژیم های مختلف احتراقی با استفاده از آن حاصل شده است. نتایج مطالعه حاضر عبارتند از:

الف- افزایش کسر مولی دی اکسید کربن درون اکسنده و کاهش دمای دیواره کوره (افزایش اتلاف حرارتی از دیواره) سبب می شود تا ضمن کاهش دمای پیشینه، فرایند احتراق در فاصله محوری دورتری نسبت به ورودی های سوخت و هوا آغاز شود. در شرایط تزریق مقادیر بالاتر دی اکسید کربن درون اکسنده، تفاوت های فیزیکی و حضور فعال تر  $CO_2$  در واکنش های شیمیایی عامل اصلی تاخیر در اشتعال است، در حالی که تحت شرایط کاهش دمای دیواره، افزایش اتلاف حرارتی و در نتیجه انرژی کم تر گازها به منظور تامین دمای لازم برای آغاز واکنش های شیمیایی عامل تاخیر در اشتعال اند.

ب- جایگزینی دی اکسید کربن با نیتروژن سبب می شود تا پیشینه غلظت رادیکال هیدروکسیل تشکیل شده درون کوره غیرپیش آمیخته به صورت قابل توجهی کاهش می یابد که نشان دهنده کاهش نرخ واکنش ها شیمیایی است. از طرفی ناحیه انجام واکنش های شیمیایی به صورت قابل توجهی گسترش می یابد که علت آن ناشی از دو موضوع است: تفاوت های فیزیکی به ویژه ظرفیت حرارتی و خواص تشعشعی عامل اول بوده و عامل دوم کاهش نرخ واکنش ها تحت شرایط استفاده از  $CO_2$  است.

ج- در رژیم های مختلف احتراقی با تغییر ترکیب اکسنده از  $N_2$  به  $CO_2$  سهم اثرات فیزیکی و شیمیایی تغییر می کند. در رژیم احتراق معمولی اثرات فیزیکی از طریق واکنش های  $O+H_2 \rightleftharpoons H+OH$ ،  $OH+HCO \rightleftharpoons H_2O+CO$ ،  $O+CH_4 \rightleftharpoons OH+CH_3$  و  $O+HO_2 \rightleftharpoons OH+O_2$  (تحت شرایط بدون اتلاف حرارت) و  $HO_2+CO \rightleftharpoons OH+CH_3O$

$2\text{OH} \rightleftharpoons \text{O} + \text{H}_2\text{O}$  (در حالت همراه با اتلاف حرارتی) عامل اصلی کاهش تولید رادیکال هیدروکسیل و در نتیجه ساختار شعله است در حالی که در رژیم احتراق بدون شعله اثرات غالب شیمیایی ناشی از واکنش های  $\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O} + \text{OH}$ ،  $\text{H} + \text{CH}_2\text{OH} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CH}_3$  و  $\text{OH} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}$  (شرایط بدون اتلاف حرارتی) و  $\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O} + \text{OH}$  و در رژیم همراه با اتلاف حرارتی) عامل اصلی در کاهش میزان هیدروکسیل تولید شده است. در رژیم احتراقی دما بالا نیز اثرات فیزیکی و شیمیایی، سهم تقریباً یکسانی داشته و از طریق واکنش های  $\text{O} + \text{H} + \text{M} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{M}$ ،  $\text{OH} + \text{CO} \rightleftharpoons \text{H} + \text{CO}_2$  و  $\text{OH} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}$ ، تولید رادیکال هیدروکسیل کاهش می یابد.

د- افزایش اتلاف حرارتی دیواره سبب کاهش قابل توجه نرخ واکنش های شیمیایی می شود. نتایج تحلیل حساسیت واکنش های شیمیایی نشان دهنده آن است که تغییر در مسیر واکنشی به علت کاهش دمای بیشینه احتراق، عامل اصلی در کاهش نرخ واکنش ها و همچنین تغییر در ساختار شعله است.

ه- شرایط حرارتی دیواره و جایگزینی  $\text{CO}_2$  با  $\text{N}_2$  درون اکسنده سبب تغییرات اساسی در نقشه رژیم های مختلف تحت شرایط احتراق غیرپیش آمیخته می شود. با افزایش اتلاف حرارتی دیواره و کسر مولی  $\text{CO}_2$  جایگزین شده با  $\text{N}_2$ ، نیاز به اکسیژن بیشتری به منظور وقوع فرایند احتراق است که این موضوع نشان دهنده افزایش ناحیه بدون احتراق تحت شرایط بیان شده است. از طرفی استفاده از  $\text{CO}_2$  بیشتر درون اکسنده و افزایش اتلاف حرارتی دیواره سبب تسهیل در تشکیل رژیم احتراقی بدون شعله به عنوان رژیم بهینه از نظر بازدهی و انتشار آلاینده ها به ویژه ناکس می شود (باید توجه داشت که وقوع واکنش های شیمیایی در ناحیه ای بسیار گسترده تحت رژیم بدون شعله نسبت به رژیم های دما بالا و معمولی سبب می شود تا بازدهی تشعشعی افزایش چشمگیری داشته و در نتیجه بازدهی کلی تحت رژیم بدون شعله نسبت به دو رژیم احتراقی دیگر افزایش یابد. این افزایش با کاهش اتلافات حرارتی از دیواره بیشتر خواهد شد؛ بنابراین شرایط مطلوب ایجاد رژیم احتراق بدون شعله با حداقل اتلاف حرارتی از دیواره کوره است).

و- تزریق دی اکسید کربن درون اکسنده منجر به افزایش انتشار  $\text{CO}$  در رژیم های احتراقی معمولی، دما بالا و بدون شعله می شود. عامل اصلی در افزایش انتشار این آلاینده در رژیم های معمولی و بدون شعله به ترتیب اثرات فیزیکی و شیمیایی جایگزینی اند در حالی که در رژیم دما بالا هر دو عامل در تولید و انتشار مونوکسید کربن نقش مهمی ایفا می کنند.

## منابع

1. R.-H. Chen, "NO<sub>x</sub> and NO<sub>2</sub> Emission of Swirl-Stabilized Nonpremixed Flames of a H<sub>2</sub>-CH<sub>4</sub> Mixture," *Combustion science and technology*, 120, 1996, pp. 321-333.
2. R. Kurose, H. Makino, A. Suzuki, "Numerical analysis of pulverized coal combustion characteristics using advanced low-NO<sub>x</sub> burner," *Fuel*, 83, 2004, pp. 693-703.
3. E. Ebrahimi Fordoei, 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*, 285, 2021, pp. 119118.
4. M. B. Toftegaard, J. Brix, P. A. Jensen, P. Glarborg, A. D. Jensen, "Oxy-fuel combustion of solid fuels," *Progress in energy and combustion science*, 36, 2010, pp. 581-625.
5. J. Wüning, J. Wüning, "Flameless oxidation to reduce thermal NO-formation," *Progress in energy and combustion science*, 23, 1997, pp. 81-94.
6. A. Cavaliere, M. De Joannon, "Mild combustion," *Progress in Energy and Combustion science*, 30, 2004, pp. 329-366.
7. M. De Joannon, A. Matarazzo, P. Sabia, A. Cavaliere, "Mild combustion in homogeneous charge diffusion ignition (HCDI) regime," *Proceedings of the Combustion Institute*, 31, 2007, pp. 3409-3416.
8. M. De Joannon, P. Sabia, G. Sorrentino, A. Cavaliere, "Numerical study of mild combustion in hot diluted diffusion ignition (HDDI) regime," *Proceedings of the Combustion Institute*, 32, 2009, pp. 3147-3154.
9. M. De Joannon, G. Sorrentino, A. Cavaliere, "MILD combustion in diffusion-controlled regimes of hot diluted fuel," *Combustion and Flame*, 159, 2012, pp. 1832-1839.
10. C. Luan, S. Xu, B. Shi, Y. Tu, H. Liu, P. Li, Z. Liu, "Re-Recognition of the MILD Combustion Regime by Initial Conditions of T in and X O<sub>2</sub> for Methane in a Nonadiabatic Well-Stirred Reactor," *Energy & Fuels*, 34, 2020, pp. 2391-2404.
11. F. Tabet, B. Sarh, I. Gökalp, "Hydrogen-hydrocarbon turbulent non-premixed flame structure," *International journal of hydrogen energy*, 34, 2009, pp. 5040-5047.

12. N. a. K. Doan, N. Swaminathan, "Autoignition and flame propagation in non-premixed MILD combustion," *Combustion and Flame*, 201, 2019, pp. 234-243.
13. T. Jaravel, E. Riber, B. Cuenot, P. Pepiot, "Prediction of flame structure and pollutant formation of Sandia flame D using Large Eddy Simulation with direct integration of chemical kinetics," *Combustion and Flame*, 188, 2018, pp. 180-198.
14. D. Butz, S. Hartl, S. Popp, S. Walthert, R. S. Barlow, C. Hasse, A. Dreizler, D. Geyer, "Local flame structure analysis in turbulent CH<sub>4</sub>/air flames with multi-regime characteristics," *Combustion and Flame*, 210, 2019, pp. 426-438.
15. A. E. Lutz, R. J. Kee, J. F. Grcar, F. M. Rupley, "OPPDIF: A Fortran program for computing opposed-flow diffusion flames," *Sandia National Labs.*, Livermore, CA (United States), 1997.
16. Y. Tu, M. Xu, D. Zhou, Q. Wang, W. Yang, H. Liu, "CFD and kinetic modelling study of methane MILD combustion in O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O atmospheres," *Applied energy*, 240, 2019, pp. 1003-1013.
17. S. Chen, J. Mi, H. Liu, C. Zheng, "First and second thermodynamic-law analyses of hydrogen-air counter-flow diffusion combustion in various combustion modes," *International journal of hydrogen energy*, 37, 2012, pp. 5234-5245.
18. G. B. Ariemma, P. Bozza, M. De Joannon, P. Sabia, G. Sorrentino, R. Ragucci, "Alcohols as Energy Carriers in MILD Combustion," *Energy & Fuels*, 35, 2021, pp. 7253-7264.
19. A. Rebola, M. Costa, P. J. Coelho, "Experimental evaluation of the performance of a flameless combustor," *Applied thermal engineering*, 50, 2013, pp. 805-815.
20. A. Rebola, P. Coelho, M. Costa, "Assessment of the performance of several turbulence and combustion models in the numerical simulation of a flameless combustor," *Combustion Science and Technology*, 185, 2013, pp. 600-626.
21. E. Ebrahimi Fordoei, K. Mazaheri, A. Mohammadpour, "Numerical study on the heat transfer characteristics, flame structure, and pollutants emission in the MILD methane-air, oxygen-enriched and oxy-methane combustion," *Energy*, 218, 2021, pp. 119524.
22. 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 Jr, "GRI 3.0 Mechanism," *Gas Research Institute* ([http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech)), 1999,
23. M. H. Moghadasi, R. Riazi, S. Tabejamaat, A. Mardani, "Effects of preheating and CO<sub>2</sub> dilution on oxy-MILD combustion of natural gas," *Journal of Energy Resources Technology*, 141, 2019, pp. 1-12,
24. E. Ebrahimi Fordoei, K. Mazaheri, "Numerical study of the effect of carbon dioxide injection on flame structure in flameless combustion regime," *Fuel and Combustion*, 13, 2020, pp. 1-26.
25. K.-P. Cheong, P. Li, F. Wang, J. Mi, "Emissions of NO and CO from counterflow combustion of CH<sub>4</sub> under MILD and oxyfuel conditions," *Energy*, 124, 2017, pp. 652-664.
26. Y. He, C. Zou, Y. Song, Y. Liu, C. Zheng, "Numerical study of characteristics on NO formation in methane MILD combustion with simultaneously hot and diluted oxidant and fuel (HDO/HDF)," *Energy*, 112, 2016, pp. 1024-1035.
27. P. Sabia, M. De Joannon, A. Picarelli, A. Chinnici, R. Ragucci, "Modeling Negative Temperature Coefficient region in methane oxidation," *Fuel*, 91, 2012, pp. 238-245.
28. P. Sabia, G. Sorrentino, A. Chinnici, A. Cavaliere, R. Ragucci, "Dynamic behaviors in methane MILD and oxy-fuel combustion. Chemical effect of CO<sub>2</sub>," *Energy & Fuels*, 29, 2015, pp. 1978-1986.
29. E. Abtahizadeh, A. Sepman, F. Hernández-Pérez, J. Van Oijen, A. Mokhov, P. De Goey, H. Levinsky, "Numerical and experimental investigations on the influence of preheating and dilution on transition of laminar coflow diffusion flames to Mild combustion regime," *Combustion and flame*, 160, 2013, pp. 2359-2374.
30. N. Kim, Y. Kim, M. N. M. Jaafar, M. R. Rahim, M. Said, "Effects of hydrogen addition on structure and NO formation of highly CO-Rich syngas counterflow nonpremixed flames under MILD combustion regime," *International Journal of Hydrogen Energy*, 46, 2021, pp. 10518-10534.
31. J. Park, S. G. Kim, K. M. Lee, T. K. Kim, "Chemical effect of diluents on flame structure and NO emission characteristic in methane-air counterflow diffusion flame," *International Journal of Energy Research*, 26, 2002, pp. 1141-1160.
32. K.-P. Cheong, G. Wang, J. Si, J. Mi, "Nonpremixed MILD combustion in a laboratory-scale cylindrical furnace: Occurrence and identification," *Energy*, 216, 2021, pp. 119295.
33. Z. Cheng, J. A. Wehrmeyer, R. W. Pitz, "Experimental and numerical studies of opposed jet oxygen-enhanced methane diffusion flames," *Combustion science and technology*, 178, 2006, pp. 2145-2163.
34. K. Safer, F. Tabet, A. Ouadha, M. Safer, I. Gökalp, "Combustion characteristics of hydrogen-rich alternative fuels in counter-flow diffusion flame configuration," *Energy conversion and management*, 74, 2013, pp. 269-278.
35. K. Safer, F. Tabet, A. Ouadha, M. Safer, I. Gökalp, "Simulation of a syngas counter-flow diffusion flame structure and NO emissions in the pressure range 1–10 atm," *Fuel processing technology*, 123, 2014, pp. 149-158.
36. Y. Tu, K. Su, H. Liu, S. Chen, Z. Liu, C. Zheng, "Physical and chemical effects of CO<sub>2</sub> addition on CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> flames on a Jet in Hot Coflow (JHC) burner," *Energy & Fuels*, 30, 2016, pp. 1390-1399.
37. Y. Tu, H. Liu, W. Yang, "Flame characteristics of CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> on a jet-in-hot-coflow burner diluted by N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, and H<sub>2</sub>O," *Energy & Fuels*, 31, 2017, pp. 3270-3280.



## English Abstract

### Numerical study of the effect of wall thermal condition and oxidant composition on the flame structure and combustion regime in non-premixed combustion furnace

Mohammadamin Atarzadeh<sup>1</sup>, Seyed Abdolmehdi Hashemi<sup>2\*</sup>, E. Ebrahimi Fordoei<sup>3</sup>

1- Department of Mechanical Engineering, Kashan University, Isfahan, Iran, [mohammadamin.atarzadeh@gmail.com](mailto:mohammadamin.atarzadeh@gmail.com)

2- Department of Mechanical Engineering, Kashan University, Isfahan, Iran, [hashemi@kashanu.ac.ir](mailto:hashemi@kashanu.ac.ir)

3- Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, [E.ebrahimifordoei@modares.ac.ir](mailto:E.ebrahimifordoei@modares.ac.ir)

\*Corresponding author

(Received: 2021.08.10, Received in revised form: 2021.09.12, Accepted: 2022.01.15)

The aim of this study is to investigate the effect of wall thermal conditions and oxidant composition on the flame structure and map of combustion regimes. For this purpose, non-premixed combustion furnace of the Lisbon University has been investigated using the open source OpenFoam software as well as chemical calculations with the help of counter-flow diffusion flame solver. In numerical study, standard k- $\epsilon$  turbulence model, modified EDC combustion model, and discrete phase radiation model with the calculation of absorption and emission coefficients at six different wavelengths have been used. The results of simulations and kinetic calculations show that the change in oxidant composition and wall thermal conditions leads to changes in reaction pathways. Replacement of CO<sub>2</sub> with N<sub>2</sub> in the oxidant and presence of heat losses lead to fundamental changes in flame structure. The presence of wall heat loss, especially in conventional and flameless combustion regimes, leads to fundamental changes in the reaction pathways and alters flame structure, while the main contribution to the changes of flame structure is different physical and chemical properties of CO<sub>2</sub> in comparison with N<sub>2</sub> at conventional and flameless regimes, respectively. In the high temperature combustion regime, the contributions of physical and chemical effects are almost equal.

**Keywords:** Non-premixed Combustion, Combustion Regime, Oxidant Composition, Thermal Condition of Wall, Flame Structure.