

مطالعه انتشار ناکس در احتراق گاز سنتز بدون شعله: اثر پارامترهای دمای ورودی، غلظت اکسیژن اکسنده، ترکیب سوخت گاز سنتز و نرخ کرنش

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

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

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

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

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۶/۲۳، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۴۰۳/۰۷/۳۰، پذیرش: ۱۴۰۳/۰۸/۲۴)

چکیده: هدف از تحقیق جاری، بررسی تأثیرات پارامترهای عملکردی کلیدی مختلف در احتراق سوخت گاز سنتز بر روی انتشار آلاینده NO، نظیر دمای ورودی اکسیدکننده، غلظت اکسیژن در ترکیب اکسیدکننده، ترکیب مختلف گاز سنتز و نرخ کرنش تحت شرایط سوخت-اکسیژن، اکسیژن غنی و سوخت-هوا است. مدل‌سازی موردنیاز با بهره‌گیری از شعله جریان متقابل و سینتیک شیمیایی GRI3.0 پیاده‌سازی شده است. به منظور بررسی سهم اثرات شیمیایی و فیزیکی ناشی از جایگزینی CO₂ با N₂، گونه خنثی FCO₂ با دو شرط عدم مشارکت در واکنش‌های شیمیایی و همچنین دارا بودن خواص فیزیکی یکسان با CO₂ بکار گرفته شده است. شاخص انتشار آلاینده NO در شرایط دمایی پایین تحت شرایط احتراق با اکسیدکننده هوا و اکسیژن خالص تفاوت چندانی با یکدیگر نداشته، در حالی که با افزایش دمای شعله به بیش از ۱۸۰۰ کلوین، انتشار آلاینده NO افزایش قابل توجهی به خصوص از طریق مکانیزم حرارتی دارد. مقایسه میان احتراق‌های سوخت-هوا، اکسیژن غنی و گاز سنتز-اکسیژن بیانگر این است که شاخص انتشار آلاینده NO تحت شرایط اکسیژن غنی حدود ۹۰ درصد و در شرایط سوخت-اکسیژن بیش از ۹۹ درصد کمتر از شرایط سوخت-هوا است. بالا بودن سطح هیدروژن در ترکیب سوخت گاز سنتز سبب تقویت مکانیزم N₂O-میانی به ویژه تحت شرایط احتراق سوخت-اکسیژن به صورت عمده از طریق واکنش R199 در تشکیل NO شده است. بررسی‌ها نشان می‌دهد در مقادیر نرخ‌های کرنش بالا به دلیل مدت زمان اقامت پایین محصولات، سطح شاخص انتشار آلاینده NO نیز کاهش می‌یابد.

کلیدواژگان: انتشار آلاینده NO، ترکیب گاز سنتز، دمای ورودی اکسیدکننده، نرخ کرنش، آنالیز حساسیت.

مقدمه

اثرات ناشی از افزایش روزافزون مصرف سوخت‌های فسیلی بر آلاینده‌گی محیط‌زیست باعث گستردگی مطالعاتی در زمینه جایگزینی سوخت‌های با ارزش حرارتی پایین و کنترل گازهای آلاینده حاصل از احتراق سوخت‌های فسیلی در دنیا شده است. اهداف اصلی در هر سیستم احتراق شامل بهبود کارایی، کاهش انتشار آلاینده‌های مضر، کاهش مصرف سوخت و بهره‌گیری از سوخت‌های پاک، پایدار، تجدیدپذیر و کم‌هزینه است [۱]. در واقع، چنین اهدافی تنها با استفاده از اشکال انرژی تجدیدپذیر قابل دستیابی هستند. برخی محققین در این خصوص تمرکز خود را به اشکال انرژی تجدیدپذیر موجود تولید شده از زیست‌توده معطوف نموده‌اند. بیوگاز یک سوخت زیستی جذاب بوده که به بازیابی انرژی‌های تجدیدپذیر و کاهش انتشار آلاینده‌ها کمک می‌کند. به عنوان نمونه سافر و همکاران [۲] به صورت عددی شعله جریان متقابل با سوخت بیوگاز در شرایط اکسیژن غنی را مورد مطالعه قرار داده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که دمای شعله با غنی‌سازی اکسیژن افزایش یافته و محدودیت‌های پایداری بهبود

می‌یابد. انتشار آلاینده NO برای سطوح پایین و متوسط اکسیژن افزایش داشته، اما با غنی‌سازی در سطح اکسیژن بالا کاهش یافته است. همچنین، احتراق گاز سنتز نیز به عنوان یک منبع انرژی تجدیدپذیر در کاربردهای صنعتی معرفی شده و مطالعه فرآیند احتراق این سوخت در صنایع تولید انرژی در حال گسترش است. در موضوع احتراق گاز سنتز مطالعات متعددی صورت گرفته است [۳، ۴]. وو و همکاران [۵] تمرکز خود را بر شبیه‌سازی احتراق جهت امکان‌سنجی علمی استفاده از گاز سنتزهای مبتنی بر زیست‌توده به عنوان سوخت مکمل در بویلر زغال‌سنگ و بخار معطوف نموده‌اند. ایشان اعلام کرده‌اند که استفاده از گاز سنتز، روش مؤثری برای کاهش آلاینده NO است. اثر مخلوط‌های رقیق‌کننده غیرقابل احتراق و ترکیبات هیدروژن در نشر NO روی یک مشعل غیربیش‌آمیخته با سوخت گاز سنتز و در حضور جسم مانع توسط چن و همکاران [۶] به صورت عددی بررسی شده است. آن‌ها نشان دادند، افزایش مقدار هیدروژن باعث کاهش نرخ کرنش و سرعت شعاعی شده که این موضوع به منظور کاهش تولید NO دارای اهمیت بالایی است. تحقیقات ایشان نشان می‌دهد که CO₂ مؤثرترین رقیق‌کننده برای کاهش انتشار NO بوده و پس از آن H₂O و N₂ در اولویت‌های بعدی قرار دارند. در واقع، CO₂ مقدار کمی رادیکال هیدروکسیل (OH) تولید می‌کند که سبب تشکیل بیشتر NO می‌شود، ولی اثر آن در کاهش NO بیشتر است. H₂O هم مقدار رادیکال هیدروکسیل را افزایش می‌دهد، اما به دلیل گرمای ویژه بالا، ممانعت از تولید NO حرارتی را به عمل می‌آورد. لی و همکاران [۷] به صورت تجربی اثر سوخت گاز سنتز حاوی رقیق‌کننده‌های خنثی مثل N₂ و CO₂ را روی پدیده فوران بررسی کردند. آن‌ها نشان دادند که استفاده از رقیق‌کننده، تأثیر منفی روی پایداری شعله گاز سنتز دارد. آن‌ها نسبت‌های هم‌ارزی که در آن فوران شعله رخ می‌دهد، در نسبت رقیق‌سازی‌های مختلف اندازه‌گیری کردند. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش نسبت رقیق‌سازی محدوده فوران افزایش یافته و به‌طور ویژه، این رفتار در سوخت‌هایی که حاوی مقدار H₂ کمتر هستند، غالب است. استایلیان‌دیس و آزیمواف [۸] یک مدل سینتیک شیمیایی جدید برای شبیه‌سازی احتراق گاز سنتز خالص و همچنین گاز سنتز n-هپتان و تولید NO در یک موتور دوگانه‌سوز ارائه کردند. دقت مدل مذکور با مقایسه نتایج عددی و داده‌های تجربی شامل پارامترهای نظیر سرعت شعله آرام، تأخیر اشتعال و پروفیل غلظت NO ارزیابی شده است. نتایج نشان می‌دهد که واکنش‌های HO₂+H₂⇌H₂O₂+H، H₂O₂+M⇌OH+OH و OH+HO₂⇌H₂O+O₂ نقش اصلی را در تحلیل تأخیر اشتعال برعهده دارند. همچنین اعلام کرده‌اند که اکسیداسیون n-هپتان و احتراق گاز سنتز تحت تأثیر واکنش‌های بنیادی CH₄ قرار گرفتند. ژو و همکاران [۹] تشکیل و کاهش NO در طی احتراق مایلد^۱ برای مخلوط سوخت‌های متان و هیدروژن در سطح وسیعی از محدوده نسبت‌های ترکیب هیدروژن از عدم هیدروژن تا هیدروژن خالص ارزیابی نموده‌اند. در احتراق مذکور زمانی که نسبت هم‌ارزی زیر ۰/۸ است، مسیر غالب برای تبدیل N₂ به NO از طریق N₂O-میانی است و در نهایت با افزایش نسبت هم‌ارزی، مسیر NNH بر مسیر N₂O-میانی غالب می‌شود تا تحت شرایط کاهشی به مسیر غالب تبدیل شود. مکانیزم NNH در مخلوط با دمای پایین‌تر و زمان اقامت کوتاه بیشتر به تولید NO کمک می‌کند. از سوی دیگر، کاهش NO در نسبت‌های بالای هیدروژن سوخت، توسط رادیکال‌های غیرهیدروکربنی که عمدتاً از طریق مسیر H+NO→HNO→NH→N₂ پیش می‌روند، مؤثر است، در حالی که توسط رادیکال‌های هیدروکربنی با تزریق هیدروژن تضعیف می‌شود.

یکی از روش‌های جدیدی که در طی دو دهه اخیر جهت کاهش انتشار اکسیدهای نیتروژن مورد استفاده قرار گرفته است، استفاده از احتراق مایلد است. از آنجا که با استفاده از این رژیم احتراقی ضمن کاهش قابل توجه اکسیدهای نیتروژن می‌توان بازدهی سیستم احتراقی را به‌طور قابل توجهی افزایش داد [۱۰، ۱۱]، مطالعات گسترده‌ای روی توسعه آن در کاربردهای مختلف و استفاده عملی از آن در صنایع انجام شده است. مطالعات مختلف نشان‌دهنده آن است که استفاده از احتراق مایلد قابلیت افزایش بازدهی تا حدود ۳۰ درصد و کاهش میزان اکسیدهای نیتروژن از ۵۰ تا ۹۰ درصد را دارا است [۱۲]. در حال حاضر رژیم احتراقی مایلد روی اصول بازچرخش گازها و گرمای محصولات احتراق عمل می‌کند. در واقع شرایط ایجاد احتراق مایلد بدین صورت است که مخلوط ورودی دمایی بیش از دمای خوداشتعالی آن داشته و اختلاف بیشینه دمای حاصل از احتراق با مخلوط

¹ MILD (Moderate or Intense Low Oxygen Dilution)

ورودی کمتر از دمای خوداشتعالی مخلوط باشد [۱۰، ۱۳]. این رژیم احتراقی در نرخ‌های رقیق‌سازی اکسیژن بسیار بزرگ‌تری نسبت به نرخ‌های متداول که برای پایدارسازی شعله‌های معمولی استفاده می‌شود، ایجاد می‌شود [۱۱]. مطالعات گسترده‌ای پیرامون دمای مخلوط ورودی و تأثیر آن بر احتراق مایلد انجام شده است [۱۱، ۱۴-۱۶]. نتایج حاصل از این بررسی‌ها نشان‌دهنده آن است که با کاهش پیش‌گرمایش مخلوط ورودی و یا حتی در صورت عدم پیش‌گرمایش مخلوط نیز می‌توان به احتراق مایلد دست یافت. هاشمی و همکاران [۱۷] با بررسی ترکیبات مختلف سوخت گاز سنتز در شرایط احتراق بدون شعله گزارش داده‌اند که استفاده از این نوع سوخت با درصد پایین هیدروژن، دستیابی به شرایط احتراق مایلد را تسهیل می‌نماید. در واقع افزایش میزان غلظت دی‌اکسید کربن در زنجیره واکنش‌های شیمیایی، موجب افزایش تأخیر در اشتعال شده که این موضوع کمک شایانی جهت نیل به شرایط احتراق مایلد می‌نماید.

تأثیر نوع سوخت گاز سنتز بر احتراق بدون شعله توسط هوآنگ و همکاران [۱۸] مورد بررسی قرار گرفته است. سوخت گاز سنتز با محتوای بیشتر گاز بی‌اثر (نیتروژن و دی‌اکسید کربن) و غلظت کمتر اجزای فعال (هیدروژن و مونواکسید کربن) دمای احتراق بالاتری را در شرایط احتراق مایلد نشان داده است. در نتیجه بازچرخش بیشتری جهت ایجاد شرایط ترمودینامیکی طرح مایلد مورد نیاز خواهد بود. همچنین، سوخت گاز سنتز غنی‌شده با هیدروژن و گاز سنتز غنی‌شده با مونواکسید کربن، سینتیک‌های شیمیایی متفاوتی را در فرآیند احتراق مخلوط مایلد نشان داده‌اند. این مطلب نیز بیان شده است که سوخت‌های گاز سنتز حاوی هیدروژن انتشار آلاینده NO را عمدتاً از طریق مکانیزم‌های N_2O -میانی و NO -باز سوزاندن تولید می‌کنند. در حالی که برای احتراق خالص هیدروژن مکانیزم NNH نقش مهم‌تری را ایفا می‌کند. همچنین گونه N_2 در سوخت گاز سنتز، دارای تأثیر فیزیکی در به تأخیر انداختن برهمکنش بین هوا و جریان سوخت بوده و اثرات قابل مشاهده‌ای بر روی اختلاط آشفته و همچنین بازچرخش گازها داشته است. از سوی دیگر، گونه CO_2 در سوخت گاز سنتز نیز اثر شیمیایی در کاهش سرعت واکنش به همراه داشته است. در نهایت، نسبت هم‌ارزی بحرانی که بالاتر از آن احتراق مایلد رخ می‌دهد، برای چهار سوخت گاز سنتز شناسایی شده است. شاکر و همکاران [۱۹] با استفاده از سوخت گاز سنتز در شرایط شعله جریان متقابل نشان داده‌اند در مطالعه تأخیر در اشتعال، حضور هیدروژن در ساختار سوخت دارای اهمیت بیشتری نسبت به حضور اکسیژن در ساختار اکسیدکننده است، همچنین افزایش نسبت هیدروژن به مونوکسید کربن منجر به کاهش فاصله محوری اشتعال به میزان حدود ۶ درصد شده است. مطالعه عددی صورت گرفته توسط موسوی و همکاران [۲۰]، ساختار ناحیه واکنش مخلوط متان، آمونیاک و سوخت گاز سنتز را تحت رژیم احتراقی بدون شعله برای کسرهای مولی مختلف گاز سنتز و آمونیاک مورد بررسی قرار داده است. آن‌ها گزارش دادند که غلظت گونه OH با کاهش کسر مولی آمونیاک، افزایش می‌یابد که این مسئله منجر به کاهش تأخیر در اشتعال شده است. همچنین، افزایش کسر مولی گاز سنتز با محتوای ثابت آمونیاک به افزایش دمای بیشینه در مجاور ناحیه ورودی منجر شده و انتشار گرما و سرعت شعله نیز در این شرایط افزایش یافته است. آن‌ها اعلام کرده‌اند که افزودن گاز سنتز در ترکیب سوخت، تولید NO را کاهش داده است. در مطالعه دیگری، شی و همکاران [۲۱] مکانیزم NO برای سوخت گاز سنتز تحت احتراق مایلد را در شرایط رقیق‌سازی با گونه‌های CO_2 ، H_2O و N_2 از طریق شعله جریان متقابل بررسی نموده‌اند. مطابق بررسی‌های صورت گرفته، افزایش نسبت H_2/CO سبب تقلیل در تشکیل NO شده و آن‌ها استفاده از H_2O را به عنوان یک رقیق‌کننده به جای CO_2 و N_2 برای به حداقل رساندن تشکیل NO توصیه کرده‌اند. برای کلیه شرایط احتراقی مایلد، سهم مکانیزم‌های سریع و سوزاندن مجدد NO در انتشار کلی آلاینده NO کمتر از ۰/۱ درصد است و این مطلب به دلیل کمبود گونه متان در ساختار سوخت است. آنالیزهای انجام‌شده حاکی از آن است که مکانیزم حرارتی کمتر از ۲۰ درصد از کل انتشار آلاینده NO را به دلیل دمای پایین واکنش به خود اختصاص می‌دهد. در حالی که سهم مسیر NNH در تشکیل آلاینده NO همیشه بیشتر از ۵۵ درصد گزارش شده است. مسیر N_2O -میانی در شرایط رقیق‌سازی با CO_2 و H_2O به دلیل افزایش اثرات جزء سوم CO_2 و H_2O از طریق واکنش $N_2+O(+M)\rightarrow N_2O(+M)$ افزایش می‌یابد، به خصوص در حالت رقیق‌سازی با H_2O ، مسیر N_2O -میانی حداکثر ۶۰ درصد از سهم تولید آلاینده NO را شامل می‌شود.

دولای و راویکریشنا [۲۲] به صورت تجربی، به شرایط احتراق بدون شعله در حالت احتراق دو مرحله‌ای با یک ترکیب مشخص از گاز سنتز ($\text{CO } 20\%$ ، $\text{H}_2 20\%$ ، $\text{CH}_4 20\%$ ، $\text{N}_2 46\%$ و $\text{CO}_2 12\%$) و محدوده غلظت $13/13$ الی 21% برای گونه O_2 دست یافته‌اند. بررسی‌های ایشان نشان می‌دهد که پایداری شعله با سطح پایین‌تر کسرهای مولی O_2 ارتقا می‌یابد. تمرکز بر روند تولید CO حاکی از این است که کاهش تولید آن در اثر کاهش غلظت اکسیژن خواهد بود و همچنین تشکیل NO در تمام مطالعات مذکور تغییر قابل توجهی نداشته است. در نهایت، آن‌ها ارزیابی کردند که پیکربندی جریان متقابل نسبت به جریان همراستا، جهت ایجاد رژیم احتراق بدون شعله مناسب‌تر است. بوستلا و همکاران [۲۳] در مقاله خود انتشار آلاینده NO تحت احتراق مایلد برای مخلوط بیوگاز و گاز سنتز را بررسی نموده‌اند. در واقع، در این تحقیق از مخلوط $\text{CH}_4/\text{CO}_2/\text{H}_2/\text{CO}$ به عنوان سوخت استفاده شده است. بررسی‌های این گروه نشان می‌دهد که برای حجم پایین متان در مخلوط سوخت، مسیر NNH در تولید آلاینده NO غالب بوده، در حالی که با افزایش غلظت متان، مکانیزم سریع در تولید آلاینده NO غالب می‌شود. هنگامی که سطح هیدروژن در ساختار سوخت ارتقا می‌یابد، مسیرهای سریع و NNH تا کسر حجمی 44% درصد هیدروژن تقویت می‌شوند. افزایش اکسیژن در ترکیب اکسیدکننده، مکانیزم حرارتی را بهبود می‌بخشد، به خصوص در کسر حجمی بیش از 17% درصد اکسیژن که این موضوع سبب می‌شود آلاینده NO عمدتاً به واسطه این مکانیزم تولید شود.

در سال‌های اخیر به منظور کنترل تولید اصلی‌ترین گاز گلخانه‌ای (دی‌اکسید کربن) که یکی از محصولات اصلی فرآیند احتراق بوده، احتراق سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی مورد توجه محققین قرار گرفته است. از سوی دیگر سوخت گاز سنتز به عنوان یک سوخت تجدیدپذیر در شرایط بحرانی انرژی می‌تواند بازدهی سیستم‌های احتراقی را تحت شرایط مشخصی افزایش دهد. یکی از روش‌های جدیدی که در طی دو دهه اخیر جهت کاهش انتشار اکسیدهای نیتروژن، افزایش بازدهی و کاهش مصرف سوخت مورد استفاده قرار گرفته است، استفاده از احتراق مایلد است. استفاده از سوخت گاز سنتز در رژیم احتراق بدون شعله در شرایط احتراقی اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن به نوبه خود می‌توان اثرات قابل توجهی در افزایش بازدهی، کاهش روند گرمایش زمین (تولید گازهای گلخانه‌ای) و تولید آلاینده‌ها داشته و همچنین راهکار جایگزین کارآمدی برای سوخت‌های تجدیدناپذیر به خصوص سوخت‌های فسیلی باشد. تحلیل مجموع این شرایط به ندرت توسط محققین صورت گرفته است. در مطالعه جاری استفاده از سوخت گاز سنتز در رژیم احتراقی بدون شعله در شرایط سوخت-هوا، سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی بررسی شده است و تأثیرات پارامترهای عملکردی کلیدی مختلفی بر روی انتشار آلاینده NO نظیر دمای ورودی اکسیدکننده، غلظت اکسیژن در ترکیب اکسیدکننده، ترکیب مختلف سوخت و نرخ کرنش بررسی شده است. سهم اثرات فیزیکی و شیمیایی ناشی از جایگزینی CO_2 با N_2 در ترکیب اکسیدکننده نیز در شرایط مختلف بیان شده است.

معادلات حاکم، هندسه و روش حل عددی

شعله نفوذی جریان متقابل برای شبیه‌سازی عددی در مطالعه جاری استفاده شده است. بکارگیری این مدل برای رژیم بدون شعله مناسب بوده و به منظور برقراری تشابه با شرایط ایجاد این رژیم، هندسه ساده و کارآمدی دارد [۱۳]. شبیه‌سازی‌های مربوطه با بهره‌گیری از کد اپدیف^۲ [۲۴] از بسته کمکین^۳ [۲۵] صورت گرفته است. هدف تحقیق جاری بررسی سینتیکی شرایط احتراقی بر روی مدل انتخاب شده است، لذا پارامترهای مؤثر غیرسینتیکی، مانند هندسه باید کمترین تأثیر را داشته باشند تا بتوان به صورت ویژه اثرات سینتیک شیمیایی را ملاحظه نمود. بکارگیری شعله‌های آرام در مدل‌سازی احتراقی جهت مطالعه نحوه تولید و توزیع آلاینده NO از اهمیت به سزایی برخوردار است. این موضوع در کاربردهای عملی نظیر شبیه‌سازی جریان‌های آشفته نیز مطرح است، به عنوان نمونه مدل فلیملت با بکارگیری مجموعه‌ای از شعله‌های آرام پیاده‌سازی شده که نشان از اهمیت روش مذکور در مدل‌سازی‌های صنعتی دارد. شرایط هندسی مطالعه جاری مطابق مطالعه تجربی ساهو و همکاران [۲۶، ۲۷] در

² OPPDIF

³ CHEMKIN

نظر گرفته شده است. مطابق شکل ۱ جریان سوخت و اکسیدکننده از طریق نازل‌های با قطر ۳ سانتی‌متر تزریق شده و فاصله نازل‌های اکسیدکننده و سوخت ۱/۲۵ سانتی‌متر است.

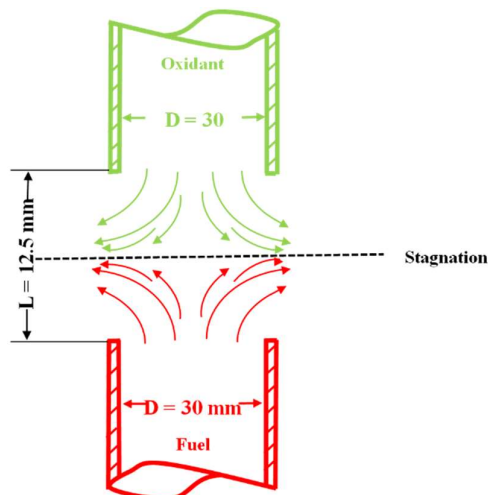


Figure 1- Counterflow geometry in the current study

شکل ۱- هندسه جریان متقابل در مطالعه جاری

مطابق شکل فوق، صفحه‌ای به نام صفحه سکون در نتیجه برخورد بین سوخت و اکسیدکننده ایجاد می‌شود که مکان آن به مقدار تکانه اکسیدکننده و سوخت بستگی دارد. جهت تشکیل ناحیه واکنش در صفحه میانی دو نازل، تعادل تکانه مطابق رابطه (۱) باید برقرار شود.

$$\rho_f U_f^2 = \rho_{ox} U_{ox}^2 \quad (1)$$

پارامتر نرخ کرنش برای ایجاد رابطه بین تکانه سوخت و اکسیدکننده تعریف می‌شود که جهت محاسبه آن از رابطه (۲) استفاده می‌شود [۲۸].

$$a = \frac{2}{L} (U_f \sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_{ox}}} + U_{ox}) \quad (2)$$

میدان جریان با کمک متغیرهای حل تشابهی و اعمال شرایط متقارن محوری بدست آمده و معادلات حاکم نیز با در نظر گرفتن متغیرهای تشابهی و توابع ویژه ساده می‌شوند [۲۴]. صورت اصلاح‌شده معادلات پایستگی جرم، تکانه، گونه‌ها و انرژی در روابط (۳) الی (۶) ارائه شده است. اولین معادله، معادله پایستگی جرم است که به شکل رابطه (۳) است.

$$F(x) = \frac{dQ(x)}{dx} \quad (3)$$

معادله تکانه محوری کاهش‌یافته نیز بدین صورت است.

$$G + 3 \frac{F^2}{\rho} + \frac{d}{dx} \left(\mu \frac{d}{dr} \left(\frac{F}{\rho} \right) \right) = 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{QF}{\rho} \right) \quad (4)$$

معادلات پایستگی گونه‌ها و پایستگی انرژی عبارتند از:

$$\frac{d}{dx} (\rho Y_k U_k) + \rho u \frac{dY_k}{dx} = \dot{\omega}_k W_k \quad (5)$$

$$u c_p \frac{dT}{dx} + \frac{dq_r}{dx} + \sum_k \dot{\omega}_k h_k + \left(\sum_k Y_k U_k c_{p,k} \right) \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) \quad (6)$$

شرایط عملکردی

در تحقیق جاری در دو قسمت به بررسی نتایج پرداخته شده است، در قسمت اول نتایج بدست آمده از مدل سازی صورت گرفته با داده‌های تجربی [۲۶، ۲۷] مقایسه شده و اعتبارسنجی نتایج در این قسمت بررسی شده است. در قسمت دوم تمرکز بر روی پارامترهای عملکردی مختلف که در انتشار آلاینده NO اهمیت بالایی دارند، معطوف شده است. این پارامترها شامل نرخ کرنش، ترکیب سوخت، دمای ورودی و غلظت اکسیژن در ساختار اکسیدکننده است.

در تحقیق جاری شرایط احتراق بدون شعله مورد توجه بوده است. در رژیم احتراقی مایلد دمای مخلوط ورودی بیشتر از دمای خوداشتعالی آن بوده و همچنین دمای خوداشتعالی مخلوط بیشتر از اختلاف بیشینه دمای فرآیند احتراق با دمای مخلوط ورودی است و برای رژیم احتراقی دما بالا نیز می‌بایست ضمن بیشتر بودن دمای ورودی نسبت به دمای خوداشتعالی، دمای خوداشتعالی از اختلاف بیشینه دمای فرآیند احتراق با دمای مخلوط ورودی کمتر باشد [۱۰]. معمولاً شرایط احتراق مایلد بوسیله بازچرخش محصولات احتراق فراهم می‌شود که در آن غلظت اکسیژن پایین بوده و محصولات احتراقی دمای بالایی دارند. انتخاب عواملی نظیر غلظت اکسیژن در ترکیب اکسیدکننده و دمای ورودی نیز به دلیل اهمیت موضوع مذکور است.

اثر شیمیایی و فیزیکی حضور گونه CO₂ در ترکیب اکسیدکننده با استفاده از گونه خنثی FCO₂ ارزیابی می‌شود. این گونه با در نظر گرفتن دو شرط به سینتیک اضافه شده است: (الف) تطابق کامل با خصوصیات فیزیکی (مانند خواص تشعشعی، جرم مولکولی، چگالی و ظرفیت گرمایی ویژه) مربوط به گونه CO₂، (ب) عدم شرکت در زنجیره واکنش‌های شیمیایی. مقایسه نتایج بدست آمده از تزریق گونه خنثی FCO₂ با N₂ نشان‌دهنده اثرات فیزیکی جایگزینی CO₂ با N₂ بوده و مقایسه نتایج حاصل از تزریق گونه‌های فعال CO₂ و گونه خنثی FCO₂ بیانگر اثرات شیمیایی تزریق مذکور است. در جداول ۱، ۲ و ۳ کسر مولی گونه‌ها در ترکیب سوخت و اکسیدکننده به همراه سایر شرایط عملکردی جهت اعتبارسنجی و بررسی‌های مورد نظر در تحقیق جاری ارائه شده است.

جدول ۱- کسر مولی گونه‌ها در ترکیب سوخت و اکسیدکننده به منظور اعتبارسنجی

Table 1- Mole fraction of species in the fuel and oxidant mixtures for validation cases

Case Title	Oxidant Mixture			Fuel Mixture			
	H ₂ /CO Ratio	X _{O₂} (%)	X _{N₂} (%)	X _{N₂} (%)	X _{CH₄} (%)	X _{H₂} (%)	X _{CO} (%)
A	0.25	21	79	2	58	8	32
B	4	21	79	2	58	32	8

جدول ۲- شرایط عملکردی در تحقیق جاری بر اساس دمای ورودی اکسیدکننده و نرخ کرنش

Table 2- Functional conditions in current research based on oxidant inlet temperature and strain rate

Case Number	Strain Rate (1/s)	Oxidant Preheating Temperature [K]	Oxidant Mixture				Fuel Mixture	
			X _{N₂} (%)	X _{O₂} (%)	X _{CO₂} (%)	X _{FCO₂} (%)	X _{H₂} (%)	X _{CO} (%)
1			0	6	94	0	80	20
2			0	6	94	0	50	50
3			0	6	94	0	20	80
4			47	6	47	0	80	20
5			47	6	47	0	50	50
6			47	6	47	0	20	80
7			94	6	0	0	80	20
8	25-800	900 < T _{in} < 2300	94	6	0	0	50	50
9			94	6	0	0	20	80
10			0	6	0	94	80	20
11			0	6	0	94	50	50
12			0	6	0	94	20	80
13			47	6	0	47	80	20
14			47	6	0	47	50	50
15			47	6	0	47	20	80

جدول ۳- شرایط عملکردی در تحقیق جاری بر اساس تغییرات کسر مولی اکسیدکننده

Table 3- Functional conditions in current research based on changes in oxidant mole fraction

Case Number	Oxidant Mixture				Fuel Mixture	
	X _{O2} (%)	X _{N2} (%)	X _{CO2} (%)	X _{FCO2} (%)	X _{H2} (%)	X _{CO} (%)
1		0	96-78	0	80	20
2		0	96-78	0	50	50
3		0	96-78	0	20	80
4		48-39	48-39	0	80	20
5		48-39	48-39	0	50	50
6		48-39	48-39	0	20	80
7		96-78	0	0	80	20
8	4-22	96-78	0	0	50	50
9		96-78	0	0	20	80
10		0	0	96-78	80	20
11		0	0	96-78	50	50
12		0	0	96-78	20	80
13		48-39	0	48-39	80	20
14		48-39	0	48-39	50	50
15		48-39	0	48-39	20	80

در بخش نتایج، به منظور تحلیل بیشتر نتایج از آنالیز حساسیت بهره‌گیری شده است که در جدول ۴ واکنش‌های اصلی قابل مشاهده است.

جدول ۴- واکنش‌های اصلی آنالیز حساسیت

Table 4- The main reactions of sensitivity analysis

Reaction Number	Chemical Reaction	Reaction Number	Chemical Reaction
R1	2O+M \leftrightarrow O ₂ +M	R84	OH+H ₂ \leftrightarrow H+H ₂ O
R3	O+H ₂ \leftrightarrow H+OH	R85	2OH(+M) \leftrightarrow H ₂ O ₂ (+M)
R4	O+HO ₂ \leftrightarrow OH+O ₂	R87	OH+HO ₂ \leftrightarrow O ₂ +H ₂ O
R12	O+CO+M \leftrightarrow CO ₂ +M	R99	OH+CO \leftrightarrow H+CO ₂
R15	O+CH ₂ O \leftrightarrow OH+HCO	R100	OH+HCO \leftrightarrow H ₂ O+CO
R33	H+O ₂ +M \leftrightarrow HO ₂ +M	R101	OH+CH ₂ O \leftrightarrow HCO+H ₂ O
R35	H+O ₂ +H ₂ O \leftrightarrow HO ₂ +H ₂ O	R166	HCO+H ₂ O \leftrightarrow H+CO+H ₂ O
R36	H+O ₂ +N ₂ \leftrightarrow HO ₂ +N ₂	R167	HCO+M \leftrightarrow H+CO+M
R38	H+O ₂ \leftrightarrow O+OH	R168	HCO+O ₂ \leftrightarrow HO ₂ +CO
R39	2H+M \leftrightarrow H ₂ +M	R178	N+NO \leftrightarrow N ₂ +O
R41	2H+H ₂ \leftrightarrow 2H ₂	R180	N+OH \leftrightarrow NO+H
R43	H+OH+M \leftrightarrow H ₂ O+M	R182	N ₂ O+O \leftrightarrow 2NO
R45	H+HO ₂ \leftrightarrow O ₂ +H ₂	R183	N ₂ O+H \leftrightarrow N ₂ +OH
R46	H+HO ₂ \leftrightarrow 2OH	R185	N ₂ O(+M) \leftrightarrow N ₂ +O(+M)
R54	H+HCO+M \leftrightarrow CH ₂ O+M	R197	NH+H ₂ O \leftrightarrow HNO+H ₂
R55	H+HCO \leftrightarrow H ₂ +CO	R199	NH+NO \leftrightarrow N ₂ O+H
R58	H+CH ₂ O \leftrightarrow HCO+H ₂	R208	NNH+O \leftrightarrow NH+NO

نتایج

نتایج اعتبارسنجی

در این بخش، منحنی تغییرات دما، گونه‌های OH و NO در امتداد محور واصل بین نازل سوخت و اکسیدکننده برای داده‌های تجربی [۲۶، ۲۷] و مطالعه عددی حاضر به منظور اعتبارسنجی روش بکار گرفته شده ترسیم شده است. مکانیزم‌های شیمیایی نقش مهمی در شبیه‌سازی احتراق دارند. بر این اساس، چهار سینتیک شیمیایی مختلف برای محاسبات سینتیک سوخت گاز سنتز بکار گرفته شده است. اولین مکانیزم GRI3.0 [۲۹] بوده که شامل ۵۳ گونه و ۳۲۵ واکنش است. مکانیزم دوم، معروف به مکانیزم سن‌دیگو^۴ [۳۰] بوده که دارای ۶۸ گونه مختلف و ۳۱۱ واکنش است. مکانیزم دیگر توسط ژانگ و همکارانش [۳۱] معرفی شده و سینگز/ناکس شام دارد که دارای ۲۵۱ واکنش و ۴۳ گونه است. برای مکانیزم چهارم نیز از مکانیزم ذکر شده در مطالعه رنزی و همکارانش [۳۲-۳۵] استفاده شده که شامل ۲۴۵۹ واکنش و ۱۵۹ گونه مختلف است.

⁴ Sandiego

⁵ Syngas/NOx

نتایج عددی حاصل از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف و داده‌های تجربی برای موارد ۱ و ۲ از جدول ۱، در شکل ۲ نمایش داده شده است. تطابق قابل قبولی بین داده‌های اندازه‌گیری شده و نتایج عددی برای توزیع دما وجود داشته و تنها داده‌های حاصل از بکارگیری مکانیزم سینگز/ناکس مقدار اندکی با مقادیر تجربی متفاوت بوده و دما را کمتر پیش‌بینی نموده است. بررسی بیشتر نتایج بیانگر این مطلب است که پیش‌بینی توزیع گونه‌های OH و NO به طور قابل توجهی به مکانیزم مورد استفاده بستگی دارد.

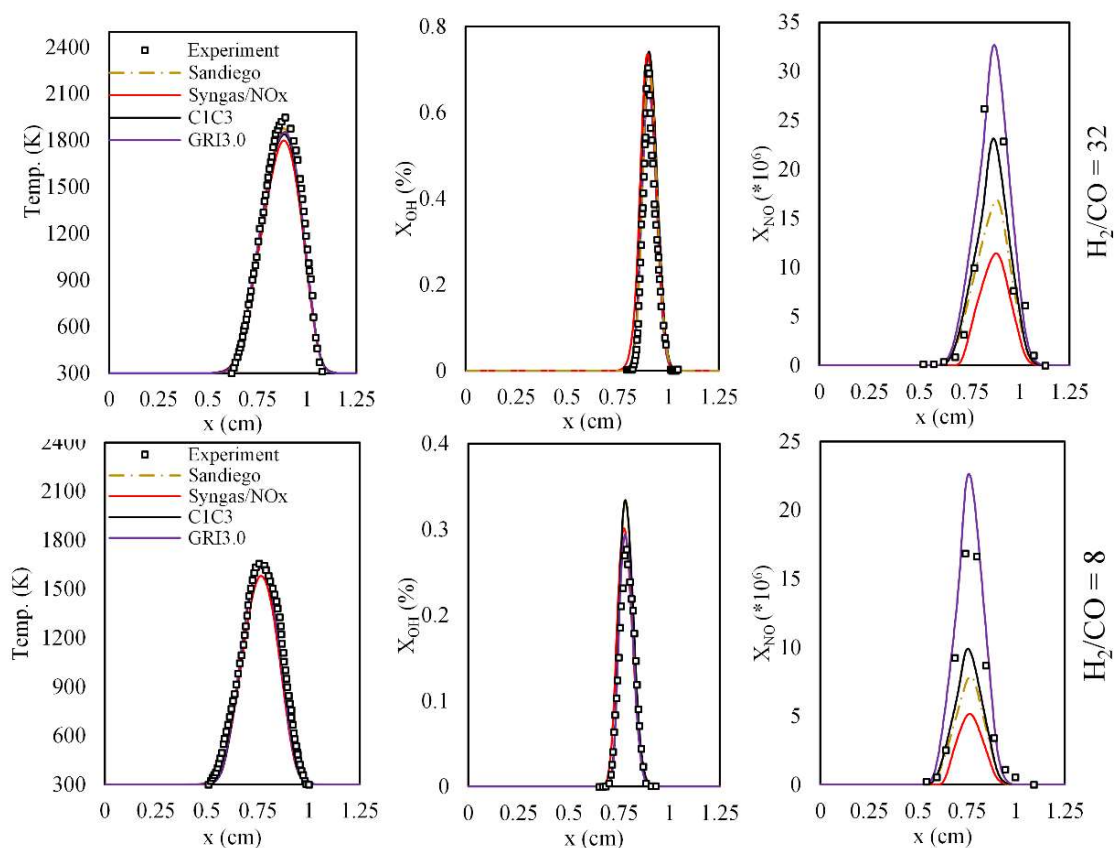


Figure 2- Validation of counterflow flame simulation with four different chemical mechanisms compared to the experimental results for two H_2/CO ratios

شکل ۲- اعتبارسنجی شبیه‌سازی شعله جریان متقابل با چهار مکانیزم شیمیایی مختلف نسبت به نتایج مطالعه تجربی در دو نسبت H_2/CO

مقادیر خطای میانگین در این مطالعه با میانگین‌گیری از تمام خطاهای نقطه‌ای تعیین شده است. برای مکانیزم GRI3.0 برای حالت B اشاره شده در جدول ۱، میانگین خطا برای پارامترهای دما، گونه NO و گونه OH به ترتیب ۳، ۱۳ و ۵/۵ درصد و برای حالت A این جدول نیز میانگین خطا برای پارامترهای دما، گونه NO و گونه OH به ترتیب ۲/۵، ۱۱ و ۵ درصد است. بررسی‌ها نشان می‌دهد، مکانیزم GRI3.0 کمترین خطای میانگین را در مقایسه با مکانیزم‌های دیگر در شرایط مختلف شبیه‌سازی ارائه می‌دهد. در نتیجه، این مکانیزم در شبیه‌سازی عددی مطالعه حاضر به کار گرفته شده است.

مطالعه پارامترهای عملکردی بر انتشار آلاینده NO

تأثیر نرخ کرنش بر انتشار آلاینده NO

به منظور حذف تأثیر رقیق‌سازی محصولات احتراقی و مقایسه انتشار NO در شرایط مختلف، مطابق رابطه (۷) از پارامتر EINO دارای واحد (g-NO/kg-fuel) برای نمایش میزان تولید گونه NO در هر واحد سوخت برای شکل‌های مورد نظر استفاده شده است [۳۶].

$$EINO = \frac{\int_0^t \dot{\omega}_{NO} MW_{NO} dx}{-\left(\int_0^t \dot{\omega}_{CO} MW_{CO} dx + \int_0^t \dot{\omega}_{H_2} MW_{H_2} dx\right)} \times 10^6 \quad (7)$$

که $\dot{\omega}_k$ و MW_k به ترتیب مربوط به نرخ تولید بر حسب مول و جرم مولکولی گونه k -ام است. شکل ۳ تغییرات شاخص انتشار گونه NO بر حسب نرخ کرنش را در دو حالت احتراقی اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن در نرخ در سه ترکیب گاز سنتز مختلف H_2/CO برابر ۴، ۱ و ۰/۲۵ تحت شرایط پایه برای دما (دمای ۱۱۰۰ کلوین برای اکسیدکننده) و سطح رقیق‌سازی واکنش‌دهنده‌ها نشان می‌دهد. با توجه به معیارهای بیان شده برای احتراق بدون شعله، کلیه شرایط مورد بررسی در این شکل تحت رژیم بدون شعله قرار دارند. به منظور تفکیک اثرات فیزیکی و شیمیایی حاصل از جایگزینی دی‌اکسید کربن با نیتروژن از گونه خنثی FCO_2 استفاده شده است. اختلاف میان نمودارهای N_2 و FCO_2 بیانگر اثرات فیزیکی جایگزینی دی‌اکسید کربن و نیتروژن و اختلاف میان نمودارهای FCO_2 با CO_2 بیانگر اثرات شیمیایی جایگزینی است. همان‌طور که مشاهده می‌شود در تمامی مقادیر نرخ‌های کرنش، مقدار بیشینه آلاینده NO تحت شرایط احتراقی سوخت-هوا منتشر شده است. با حرکت به سمت احتراق اکسیژن غنی از سطح آلاینده NO تولید شده به صورت قابل توجهی کاسته (کاهش بیش از ۵۰ درصدی در تمامی حالات) می‌شود. انتقال به احتراق سوخت-اکسیژن منجر به کاهش گونه NO تولید شده به ۰/۵ ppm می‌شود. کاهش شاخص انتشار آلاینده NO با جایگزینی CO_2 با N_2 ناشی از دو عامل اثرات فیزیکی و شیمیایی است. با توجه به بررسی انجام شده در مطالعه حاضر، سهم عمده اثرات فیزیکی مربوط به ظرفیت گرمایی ویژه بالاتر CO_2 نسبت به N_2 و خواص تشعشعی به ویژه ضریب گسیل بسیار بزرگ‌تر دی‌اکسید کربن نسبت به نیتروژن است. بررسی اثرات فیزیکی نیز از دو جنبه قابل بررسی است. در وهله اول حضور فعال‌تر دی‌اکسید کربن در واکنش‌های شیمیایی نسبت به N_2 و از طرف دیگر کاهش دمای احتراق در شرایط اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن که منجر به کاهش ضرایب نرخ واکنش‌های شیمیایی می‌شود که این موضوع به وسیله تحلیل حساسیت واکنش‌های شیمیایی بررسی خواهد شد. لازم به ذکر است که تحت شرایط سوخت-اکسیژن با توجه به دمای بیشینه نسبتاً پایین تحت رژیم بدون شعله، کاهش سطح نیتروژن در دسترس نیز خود عاملی مؤثر در کاهش شاخص انتشار آلاینده NO است. برای تمامی حالات رقیق‌ساز مورد استفاده تغییرات گونه NO منتشر شده بر حسب نرخ کرنش نشان از روند افزایش میزان انتشار در مقادیر نرخ کرنش‌های پایین دارد. سپس روند کاهشی مقدار NO با شیب کندتری نسبت به روند افزایشی اولیه مشاهده می‌شود. علت این موضوع مربوط به سرعت واکنش‌دهنده‌ها و مدت زمان اقامت محصولات احتراقی است. در نرخ‌های کرنش پایین مدت زمان اقامت بالا بوده و منجر به تشکیل ناحیه واکنشی گسترده شده که در آن سوخت و اکسیدکننده با سرعت‌های پایین از طریق نازل جریان می‌یابند؛ در حالی که نرخ کرنش‌های بالا وابسته به مدت‌های زمان اقامت پایین و سرعت‌های واکنش‌دهنده بالا می‌شود. با توجه به توضیح داده شده در ارتباط با اثر نرخ کرنش بر مدت زمان اقامت و سرعت جریان‌های سوخت و هوا باید گفت که در نرخ‌های کرنش پایین، اگرچه مدت زمان اقامت بالا شرایط مناسبی برای تولید آلاینده NO فراهم می‌آورد، اما سرعت جریان واکنش‌دهنده‌ها به شکلی است که با وجود ایجاد شرایط مناسب برای دستیابی به سطح بالایی از اختلاط سوخت و هوا شرایط برای وقوع واکنش‌های اصلی احتراقی و تشکیل شعله‌ای پایدار فراهم نمی‌باشد. در مقادیر نرخ‌های کرنش بالا، مدت زمان اقامت محصولات پایین بوده که منجر به کاهش سطح شاخص انتشار آلاینده NO می‌شود. از این رو می‌توان گفت با توجه به برهمکنش میان پارامترهای مدت زمان اقامت و سرعت جریان‌های سوخت و هوای ورودی روی شاخص انتشار آلاینده NO، مقدار

بیشینه EINO در مقادیر بین ۵۰ تا ۷۵ اتفاق می‌افتد. در احتراق سوخت-هوا افزایش هیدروژن موجود در ساختار گاز سنتز، کاهش گونه NO تولید شده را به همراه دارد که این موضوع با نتیجه مطالعه [۳۷] مطابقت دارد، در حالی که تحت شرایط اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن مقدار انتشار این آلاینده مستقل از ترکیب سوخت است.

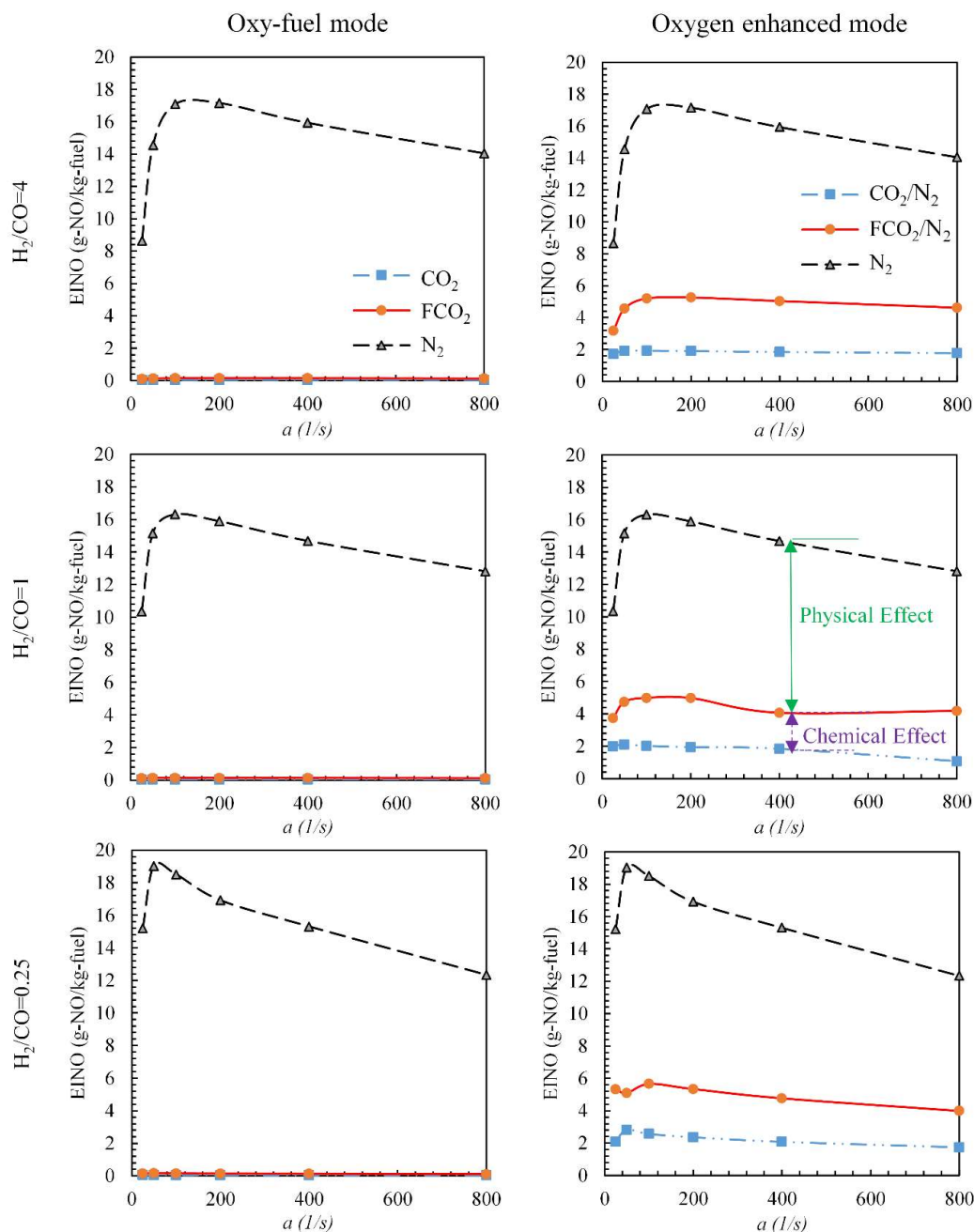


Figure 3- EINO versus strain rate under two oxy-fuel and oxygen enhanced combustion modes in three different H_2/CO ratios
 شکل ۳- شاخص انتشار آلاینده NO بر حسب نرخ کرنش در دو حالت احتراقی سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی در سه نسبت سوخت
 مختلف H_2/CO

از نظر کاربردی می‌توان گفت که با انتقال از احتراق گاز سنتز- هوا به سوخت-اکسیژن، تحت شرایط دما و سطح رقیق‌سازی مشخص ورودی واکنش‌دهنده‌ها، استفاده از احتراق در نرخ‌های کرنش به اندازه کافی پایین یا به اندازه کافی بالا با در نظر گرفتن تشکیل شعله پایدار تحت رژیم بدون شعله، می‌تواند شرایط بهینه‌ای از نظر سطح انتشار آلاینده NO از فرآیند احتراق به همراه آورد و این موضوع مستقل از نسبت سوخت H₂/CO است.

به منظور بررسی مسیره‌های تولید گونه NO، از روش آنالیز حساسیت استفاده شده است. برای این تحلیل، ابتدا تعدادی از واکنش مهم در تولید یا مصرف گونه مورد نظر که از نظر کمی با آنالیز حساسیت تعیین می‌شوند، مشخص می‌شوند. ضریب پیش نمایی (C_{S,jk}) به عنوان غلظت گونه نرمال شده [۳۸] معرفی شده که به صورت رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$C_{S,jk} = \frac{P_j \delta Y_k}{Y_k \delta P_j} \quad (۸)$$

که P_j ضریب پیش نمایی آرنیوس برای واکنش j و Y_k غلظت گونه k -ام است. علامت منفی C_{S,jk} بیانگر این مطلب است که واکنش j در روند کاهش تولید گونه k -ام تأثیرگذار است و بالعکس. آنالیز حساسیت واکنش‌های شیمیایی نسبت به تولید آلاینده NO تحت نرخ کرنش ۵۰ و ۴۰۰ برای دو حالت احتراقی اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن و دو ترکیب سوخت گاز سنتز متفاوت در شکل ۴ نشان داده شده است. تحت شرایط گاز سنتز-اکسیژن، مسیره‌های واکنشی به گونه‌ای هستند که مکانیزم‌های NNH و N₂O-میانی ریشه‌های اصلی تشکیل و انتشار آلاینده NO هستند. در نرخ‌های کرنش پایین و شرایط احتراقی گاز سنتز-اکسیژن، سهم مکانیزم N₂O-میانی از طریق تقویت مسیره‌های واکنشی منتهی به واکنش R199 افزایش می‌یابد. برای وقوع واکنش R199، هیدروژن مورد نیاز برای واکنش با N₂O تشکیل شده از طریق واکنش‌های R183 و R185 بیان شده در جدول ۴ به وسیله واکنش‌های R33، R35 و R36 فراهم می‌شود. نکته قابل توجه در آنالیز حساسیت این است که با توجه به پایین بودن دمای بیشینه شعله که در نتیجه سطح رقیق‌سازی و پیش‌گرمایش شرایط پایه در نظر گرفته شده (به عنوان شرایط متداول مرتبط با احتراق بدون شعله) حاصل شده است، مکانیزم حرارتی نقش چندانی در تولید و انتشار آلاینده NO ندارد و نتیجه آن سطح پایین تشکیل آلاینده NO است. برای انجام واکنش R208 به عنوان واکنش اصلی مکانیزم NNH، لازم است مقدار کافی اتم اکسیژن در مخلوط واکنشی وجود داشته باشد. این اتم اکسیژن برای شرایط نرخ کرنش پایین از طریق واکنش R38 تأمین شده و برای نرخ‌های کرنش بالا، علاوه بر واکنش ذکر شده، اتم اکسیژن از طریق واکنش R3 تأمین می‌شود. با تغییر ترکیب گاز سنتز و افزایش هیدروژن موجود در آن، از سهم مکانیزم N₂O-میانی کاسته شده و می‌توان گفت مکانیزم NNH نقش اصلی در انتشار آلاینده NO را برعهده دارد.

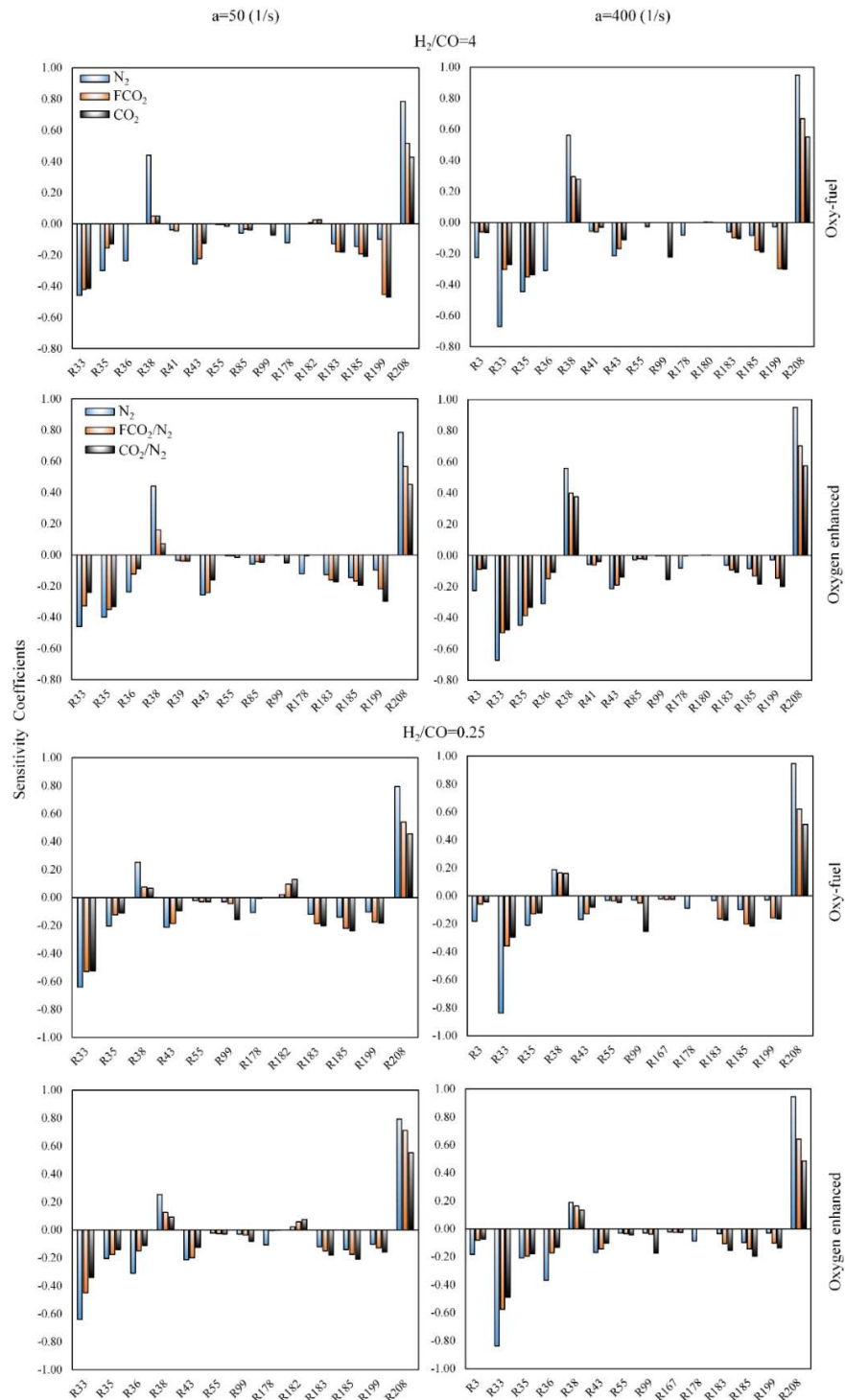


Figure 4- Sensitivity analysis of NO production for strain rates of 50 and 400 (1/s) under two oxy-fuel and oxygen enhanced combustion modes in two different H_2/CO ratios
 شکل ۴- آنالیز حساسیت واکنش‌ها نسبت به تولید آلاینده NO تحت نرخ کرنش ۴۰۰ (1/s) و ۵۰ (1/s) برای دو حالت احتراقی اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن و دو نرخ هیدروژن به مونوکسید کربن مختلف

در شکل ۵ منحنی تغییرات حداکثر دمای شعله برحسب نرخ‌های کرنش مختلف در رژیم احتراق بدون شعله در شرایط اکسیژن غنی، سوخت-اکسیژن و سوخت-هوا برای نسبت‌های مختلف H_2/CO ترسیم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با جایگزینی دی‌اکسید کربن با نیتروژن، مقدار دمای بیشینه در تمامی نرخ‌های کرنش کاهش می‌یابد. در کاهش دمای بیشینه سهم اثرات شیمیایی که بیانگر حضور فعالتر دی‌اکسید کربن نسبت به نیتروژن در واکنش‌های شیمیایی است نسبت به اثرات فیزیکی که به صورت عمده ناشی از ظرفیت حرارتی بالاتر و ضرایب تشعشعی بزرگتر دی‌اکسید کربن نسبت به نیتروژن است، بیشتر است. بیشتر بودن سهم اثر شیمیایی مستقل از نرخ کرنش، ترکیب سوخت و شرایط احتراقی اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن است. همچنین می‌توان مشاهده کرد که اثر تغییر گونه رقیق‌ساز در نرخ‌های کرنش بالاتر بسیار بیشتر از نرخ‌های کرنش پایین‌تر است.

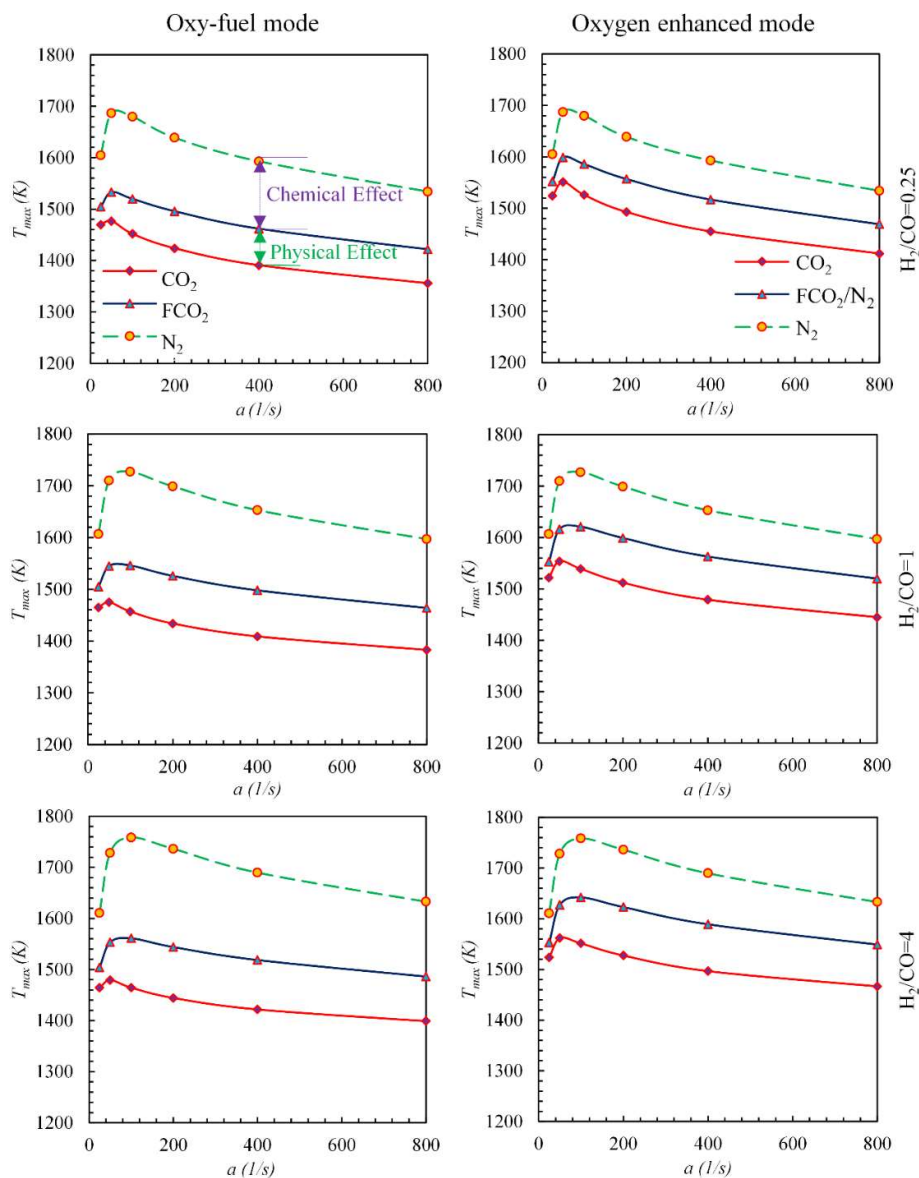


Figure 5- T_{max} in terms of different strain rates for oxygen enhanced and oxy-fuel conditions and three different H_2/CO fuel ratios
 شکل ۵- منحنی بیشینه دما بر حسب نرخ‌های کرنش مختلف برای شرایط اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن و سه نسبت سوخت متفاوت

تأثیر دمای ورودی اکسیدکننده بر انتشار آلاینده NO

شکل ۶ تغییرات شاخص انتشار آلاینده NO را بر حسب دمای ورودی اکسیدکننده به عنوان یکی از پارامترهای کلیدی در تشکیل احتراق بدون شعله در شرایط پایه برای نرخ کرنش ($a=200$ 1/s) و سطح رقیق‌سازی واکنش‌دهنده‌ها در ترکیب‌های مختلف سوخت گاز سنتز برای دو حالت احتراقی اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن نشان می‌دهد. تمامی نمونه‌های مورد بررسی تحت رژیم بدون شعله می‌باشند. جایگزینی CO_2 با N_2 در احتراق اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن در تمامی دماهای اکسیدکننده ورودی منجر به کاهش قابل توجه شاخص انتشار آلاینده NO می‌شود. این کاهش به گونه‌ای است که در احتراق اکسیژن غنی بدون شعله بیش از ۷۵ درصد و در احتراق سوخت-اکسیژن بدون شعله حدود ۹۵ درصد است. همچنین افزایش هیدروژن موجود در ترکیب گاز سنتز در از مقادیر دمای اکسیدکننده بیش از ۱۵۰۰ کلویی منجر به افزایش قابل توجهی در انتشار آلاینده NO شده که درصد این افزایش به صورت پیوسته با افزایش دمای ورودی اکسیدکننده افزایش می‌یابد (باید توجه داشت که بیشترین میزان افزایش در این حالت مربوط به احتراق سوخت-هوا، سپس شرایط اکسیژن غنی و در نهایت شرایط احتراقی سوخت-اکسیژن است).

نتایج نشان‌دهنده آن است که افزایش دمای ورودی به طور پیوسته منجر به افزایش شاخص انتشار آلاینده NO می‌شود. این افزایش به گونه‌ای است که تا دمای ۱۸۰۰ کلویی شعله (دمای ورودی اکسیدکننده ۱۴۵۰ تا ۱۶۰۰ کلوین تحت شرایط سوخت-هوا، محدوده دمای ورودی اکسیدکننده ۱۵۵۰ تا ۱۷۰۰ برای شرایط اکسیژن غنی و دمای ورودی اکسیدکننده ۱۶۰۰ تا ۱۷۵۰ برای شرایط سوخت-اکسیژن) مقدار شاخص انتشار گونه NO مقدار کمی داشته و افزایش آن با دمای ورودی اکسیدکننده تقریباً خطی است؛ در حالی که با افزایش دمای شعله به بیش از ۱۸۰۰ کلوین با توجه به فعال شدن مکانیزم حرارتی، افزایش انتشار آلاینده NO روندی نمایی پیدا می‌کند. این افزایش به گونه‌ای است که حتی تحت شرایط احتراقی اکسیژن غنی نیز سطح قابل توجهی از انتشار آلاینده مذکور مشاهده می‌شود.

تأثیر افزایش دمای اکسیدکننده ورودی روی احتراق اکسیژن غنی به گونه‌ای است که در دماهای پایین اثرات فیزیکی به طور عمده منجر به کاهش تولید گونه NO می‌شود، در حالی که در دماهای بالای اکسیدکننده، اثرات فیزیکی و شیمیایی سهم تقریباً برابری در انتشار آلاینده NO خواهند داشت. اثرات شیمیایی مربوط به کاهش انتشار این آلاینده در ادامه و با بررسی تحلیل حساسیت واکنش‌های احتراقی انجام خواهد شد. برای احتراق سوخت-اکسیژن تحت کسر مولی نیتروژن ۳ درصد در نظر گرفته شده در مطالعه حاضر در تمامی دماهای اکسیدکننده ورودی، اثرات فیزیکی عامل اصلی کاهش قابل توجه انتشار گونه NO می‌باشند و سهم کمی از این انتشار نیز می‌تواند مربوط به سطح نیتروژن موجود در واکنش‌دهنده‌ها باشد. اثرات فیزیکی و شیمیایی بیان‌شده برای هر دو احتراق در این قسمت مستقل از ترکیب سوخت گاز سنتز است.

از منظر کاربردهای صنعتی باید اشاره کرد که در شرایط عملکردی بدون شعله دما بالا که دستیابی به دمای بالا با افزایش دمای اکسیدکننده ورودی صورت می‌گیرد، پیشنهاد می‌شود تا از ترکیب‌های سوخت گاز سنتز با هیدروژن کمتر تحت شرایط اکسیژن غنی یا سوخت-اکسیژن استفاده شده که در این شرایط مطابق با نتایج بدست آمده برای توزیع دما لازم است تا دمای اکسیدکننده ورودی حدود ۱۰۰ تا ۲۰۰ کلوین بیشتر از شرایط سوخت-هوا مورد استفاده قرار گیرد؛ در حالی که تحت شرایط دمایی پایین، شاخص انتشار آلاینده NO تحت شرایط احتراق با اکسیدکننده هوا و اکسیژن خالص تفاوت چندانی با یکدیگر از نظر شاخص انتشار گونه NO نداشته و بیشتر ساختار شعله و امکان دستیابی به احتراق بدون شعله در آن‌ها متفاوت خواهد بود.

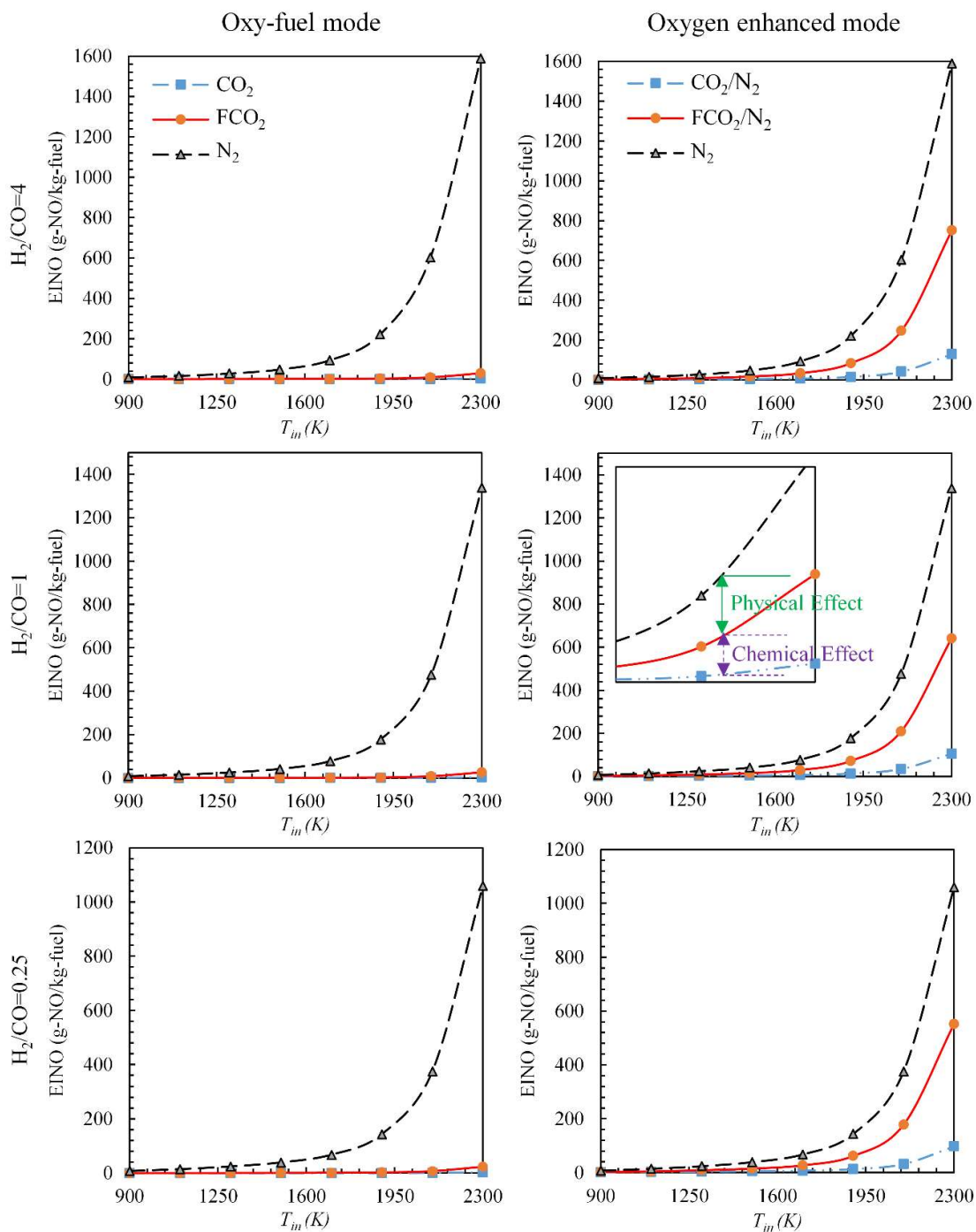


Figure 6- EINO versus oxidant inlet temperature under two oxy-fuel and oxygen enhanced combustion modes in three different H_2/CO ratios

شکل ۶- تغییرات شاخص انتشار آلاینده NO بر حسب دمای ورودی اکسیدکننده در دو حالت احتراقی سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی در سه نسبت سوخت H_2/CO مختلف

شکل ۷ آنالیز حساسیت واکنش‌های شیمیایی نسبت به تولید آلاینده NO را تحت شرایط دمای اکسیدکننده ورودی ۹۰۰ و ۲۱۰۰ کلوین برای دو حالت احتراقی اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن و دو ترکیب سوخت گاز سنتز متفاوت نشان می‌دهد. در دماهای پایین اکسیدکننده ورودی برای احتراق سوخت-هوا، مکانیزم NNH عامل اصلی انتشار آلاینده NO است که این نتیجه مطابق با داده‌های مطالعه [۳۷] است. واکنش R208 واکنش اصلی در تشکیل این آلاینده از طریق مکانیزم NNH است که در آن NNH با اتم اکسیژن تشکیل شده از طریق واکنش‌های R3 و R38 واکنش داده و منجر به تشکیل آلاینده مذکور می‌شود. از طرفی در شرایط احتراقی اکسیژن غنی مشاهده می‌شود که سهم مکانیزم NNH کاهش یافته و تولید NO از طریق مکانیزم N_2O -میانی افزایش می‌یابد. در این شرایط N_2O تشکیل شده در واکنش R183 با اتم هیدروژن که به طور عمده از طریق واکنش‌های R33 و R35 تشکیل شده، سبب می‌شود تا نرخ تشکیل NO از طریق مکانیزم N_2O -میانی افزایش یابد. با انتقال از احتراق اکسیژن غنی به احتراق سوخت-اکسیژن سهم مکانیزم NNH کاهش بیشتری پیدا کرده و بر سهم مکانیزم N_2O -میانی افزوده شود. لازم به ذکر است که با توجه به نتایج بدست آمده، سهم اثرات فیزیکی در کاهش تولید NO از طریق مکانیزم NNH و افزایش تشکیل NO از طریق مکانیزم N_2O -میانی غالب‌تر از اثرات شیمیایی جایگزینی CO_2 با N_2 بوده و تزریق بیشتر CO_2 درون اکسیدکننده، سهم اثرات فیزیکی را افزایش می‌دهد که ناشی از دو عامل ظرفیت گرمایی ویژه بسیار بالاتر CO_2 نسبت به N_2 و خواص تشعشعی متفاوت این دو گونه نسبت به یکدیگر است. نکته قابل توجه دیگر سهم پایین مکانیزم حرارتی در تمامی شرایط احتراقی مورد بررسی است که علت سطح پایین NO تولید شده در دماهای پایین، عدم فعال بودن این مکانیزم به علت دماهای بیشینه شعله پایین است. در شرایط احتراقی اکسیژن غنی، سهم مکانیزم حرارتی در دمای ۹۰۰ کلوین بسیار ناچیز بوده، به گونه‌ای که می‌توان از آن صرف‌نظر کرد.

با افزایش دمای اکسیدکننده ورودی از ۹۰۰ به ۲۱۰۰ کلوین، دمای بیشینه شعله مقدار بیش از ۱۸۰۰ کلوین داشته و سبب می‌شود تا مکانیزم حرارتی در تولید آلاینده NO نقش ویژه‌ای ایفا نماید. در شرایط استفاده از اکسیدکننده N_2 می‌توان مشاهده کرد که اغلب NO تولید شده از طریق مکانیزم حرارتی بوده و مکانیزم NNH نقش ناچیزی در انتشار NO بر عهده دارد. جایگزینی CO_2 با N_2 سبب می‌شود با توجه به کاهش دمای بیشینه شعله، از سهم مکانیزم حرارتی کاسته شده، به گونه‌ای که در شرایط سوخت-اکسیژن تولید آلاینده NO از طریق هر سه مکانیزم حرارتی، NNH و N_2O -میانی سهم قابل توجهی است. در تمامی شرایط اکسیدکننده مورد استفاده و مستقل از ترکیب سوخت، مکانیزم حرارتی از طریق واکنش R178 که در آن نیتروژن موجود در سوخت با اتم اکسیژن واکنش می‌دهد و منجر به تشکیل NO می‌شود، نقشی فعال و تأثیرگذار ایفا می‌کند. در شرایط احتراقی سوخت-هوا، اتم اکسیژن مورد نیاز به طور عمده از طریق واکنش‌های R33 و R38 تولید می‌شود، در حالی که برای احتراق اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن اتم مورد نیاز حاصل فعال بودن واکنش‌های R12 و R185 برای نسبت سوخت H_2/CO برابر ۰/۲۵ و واکنش‌های R1 و R185 برای نسبت سوخت H_2/CO برابر ۴ است.

تأثیر ترکیب سوخت گاز سنتز بر مسیرهای واکنشی و مکانیزم‌های تولید NO به گونه‌ای است که بالاتر بودن هیدروژن موجود در ساختار سوخت سبب می‌شود تا مکانیزم N_2O -میانی به ویژه تحت شرایط احتراق سوخت-اکسیژن تقویت شود که علت آن افزایش سطح هیدروژن موجود در سوخت برای انجام واکنش R199 به عنوان واکنش اصلی مکانیزم N_2O -میانی در تشکیل NO است. از طرفی سطح بالاتر هیدروژن در سوخت سبب افزایش نرخ واکنش‌های شیمیایی و در نتیجه افزایش دمای احتراقی می‌شود. از این رو سهم مکانیزم حرارتی نیز تحت شرایط گاز سنتز با هیدروژن غنی به علت بیشینه دمای بالاتر، افزایش می‌یابد.

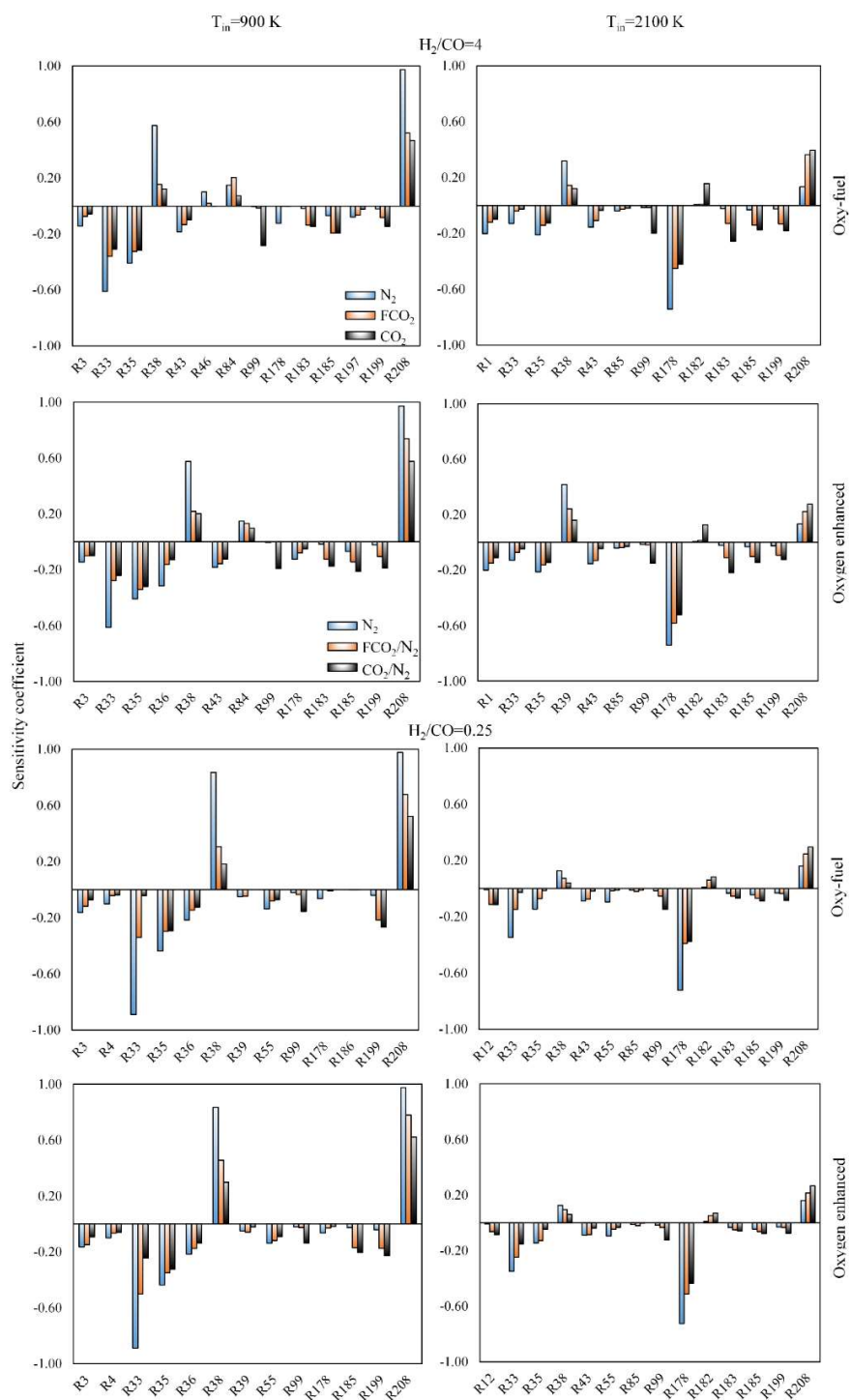


Figure 7- Sensitivity analysis of NO production for oxidant inlet temperature of 900 and 2100 K under two oxy-fuel and oxygen enhanced combustion modes in two different H_2/CO ratios
 شکل ۷- آنالیز حساسیت واکنش‌های شیمیایی نسبت به تولید آلاینده NO تحت دماهای ورودی اکسیدکننده ۹۰۰ و ۲۱۰۰ کلوین برای دو حالت احتراقی اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن و دو نسبت سوخت مختلف

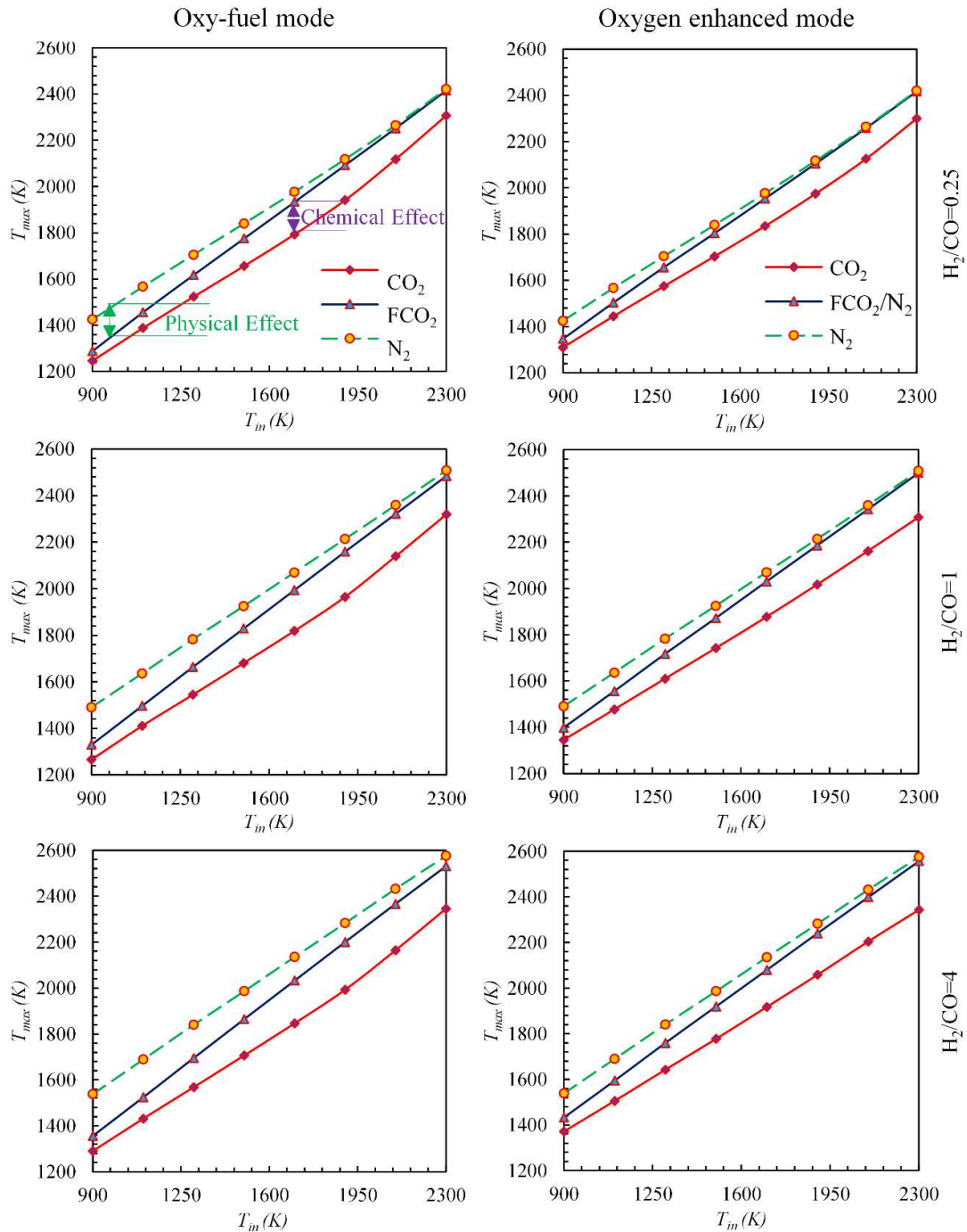


Figure 8- T_{max} in terms of different inlet temperatures for oxygen enhanced and oxy-fuel conditions and three different H_2/CO ratios

شکل ۸- منحنی بیشینه دما بر حسب دماهای ورودی مختلف برای شرایط اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن و سه نسبت سوخت متفاوت

تغییرات حداکثر دمای شعله بر حسب دمای پیش گرمایش اکسیدکننده در رژیم احتراق بدون شعله در شرایط سوخت-اکسیژن، اکسیژن غنی و سوخت-هوا برای نسبت‌های مختلف H_2/CO در شکل ۸ نشان داده شده است. بررسی مذکور با بکارگیری گونه اصلی CO_2 و گونه خنثی FCO_2 صورت گرفته است. ایجاد سطوح بالاتر برای دمای ورودی، حداکثر دمای احتراق را افزایش داده و این افزایش برای مقادیر بزرگ‌تر نسبت H_2/CO شدیدتر است. این موضوع به دلیل افزایش نفوذ گونه H_2 و افزایش سرعت واکنش‌ها به دلیل افزایش در دسترس بودن H_2 در منطقه واکنشی است. کاهش نسبت H_2/CO باعث کاهش حداکثر دمای شعله شده است. بررسی دقیق‌تر مقدار حداکثر دما در شرایط دمای پیش گرمایش یکسان برای حالت‌های اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن نشان می‌دهد که دمای بیشینه بالاتر در شرایط اکسیژن غنی فراهم می‌شود. به عبارت دیگر در حالت سوخت-اکسیژن مقدار گرمای بیشتری از احتراق جذب شده و به تبع آن دمای محصولات احتراق پایین‌تر است. این امر عمدتاً به این دلیل است که کسر مولی بالاتر گونه CO_2 در شرایط سوخت-اکسیژن در مقایسه با اکسیژن غنی و ضمناً مشارکت فعال گونه CO_2 در واکنش‌های تجزیه‌ای گرماگیر با توجه به ظرفیت حرارتی ویژه بالای این گونه سبب می‌شود، بخشی از حرارت تولیدی توسط این گونه جذب شده و منجر به کاهش دمای محصولات احتراقی شود. با کاهش نسبت H_2/CO ، حداکثر دمای شعله برای رژیم‌های اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن به یکدیگر نزدیک می‌شوند.

تأثیر سطح رقیق‌سازی اکسیدکننده بر شاخص انتشار آلاینده NO

تغییرات شاخص انتشار آلاینده NO بر حسب کسر مولی اکسیژن موجود در ساختار اکسیدکننده که بیانگر سطح رقیق‌سازی مخلوط واکنشی به عنوان یکی دیگر از پارامترهای مؤثر در تشکیل احتراق بدون شعله است، برای ترکیب‌های مختلف سوخت گاز سنتز در دو حالت احتراقی اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن در شکل ۹ نشان داده شده است. به طور کلی افزایش سطح اکسیژن موجود در اکسیدکننده منجر به افزایش نرخ واکنش‌های شیمیایی و در نتیجه حرارت آزادشده از آن‌ها شده و با افزایش بیشتر دمای بیشینه شعله همراه خواهد بود. افزایش در حرارت آزادشده و بیشینه دما منجر به گذر از رژیم احتراق بدون شعله به رژیم دما بالا خواهد شد که تشکیل رژیم بالا تحت هر شرایط احتراقی روی نمودارها نشان داده شده است. به طور کلی افزایش کسر مولی اکسیژن موجود در ترکیب اکسیدکننده از طریق تغییر در مسیرهای واکنشی به همراه فعال کردن مکانیزم حرارتی در تولید آلاینده NO منجر به افزایش شاخص انتشار این آلاینده می‌شود. بحث پیرامون تغییر مسیرهای واکنشی در قسمت بعد با تحلیل حساسیت واکنش‌های شیمیایی مورد ارزیابی قرار خواهد گرفت. از طرفی می‌توان مشاهده کرد که میزان شاخص انتشار آلاینده NO تحت شرایط سوخت گاز سنتز با هیدروژن بیشتر به صورت قابل توجهی بیش‌تر از شرایط استفاده از این سوخت با مقادیر پایین هیدروژن است که این موضوع به علت افزایش هیدروژن در دسترس برای افزایش سطح رادیکال هیدروکسیل تولید شده و در نتیجه افزایش نرخ واکنش‌های شیمیایی است. باید توجه داشت که تأثیر افزایش هیدروژن درون ترکیب سوخت گاز سنتز در مقادیر بالاتر کسر مولی اکسیژن موجود در ترکیب اکسیدکننده بیشتر است که ناشی از افزایش سطح اکسیژن موجود در مخلوط واکنشی برای تشکیل رادیکال هیدروکسیل است.

در مقایسه میان احتراق‌های سوخت-هوا، اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن می‌توان مشاهده کرد که شاخص انتشار آلاینده NO تحت شرایط اکسیژن غنی حدود ۹۰ درصد و در شرایط سوخت-اکسیژن بیش از ۹۹ درصد کمتر از شرایط استفاده از ترکیب O_2/N_2 به عنوان اکسیدکننده است. بر اساس نتایج علت کاهش EINO تحت شرایط سوخت-اکسیژن به طور کلی وابسته به تفاوت‌های فیزیکی میان نیتروژن و دی‌اکسید کربن بوده و اثرات شیمیایی نقش چندانی در کاهش شاخص EINO تحت شرایط مطالعه حاضر ایفا نمی‌کند. همچنین در حالت احتراقی اکسیژن غنی می‌توان مشاهده کرده که عامل اصلی کاهش انتشار گونه NO در تمامی مقادیر کسر مولی اکسیژن، تفاوت‌های فیزیکی بوده (بین ۷۰ تا ۹۰ درصد) و سهم اثرات شیمیایی و تغییر در مسیرهای واکنشی در اثر جایگزینی CO_2 با N_2 همواره کمتر از ۳۰ درصد است و این نتیجه مستقل از ترکیب سوخت گاز سنتز است. بر اساس تفسیرهای انجام‌شده، کسر مولی اکسیژن موجود در ترکیب اکسیدکننده محدودیتی برای احتراق سوخت-

اکسیژن بدون شعله فراهم نمی‌کند، در حالی که هرچه به سمت شرایط سوخت-هوا انتقال صورت گیرد، لازم است در مقادیر سطح رقیق‌سازی پایین اکسیدکننده (کسر مولی‌های بالای اکسیژن) ضمن استفاده از ترکیب سوخت گاز سنتز با سطح هیدروژن پایین‌تر تا حد امکان از میزان کسر مولی گونه O_2 کاسته شود.

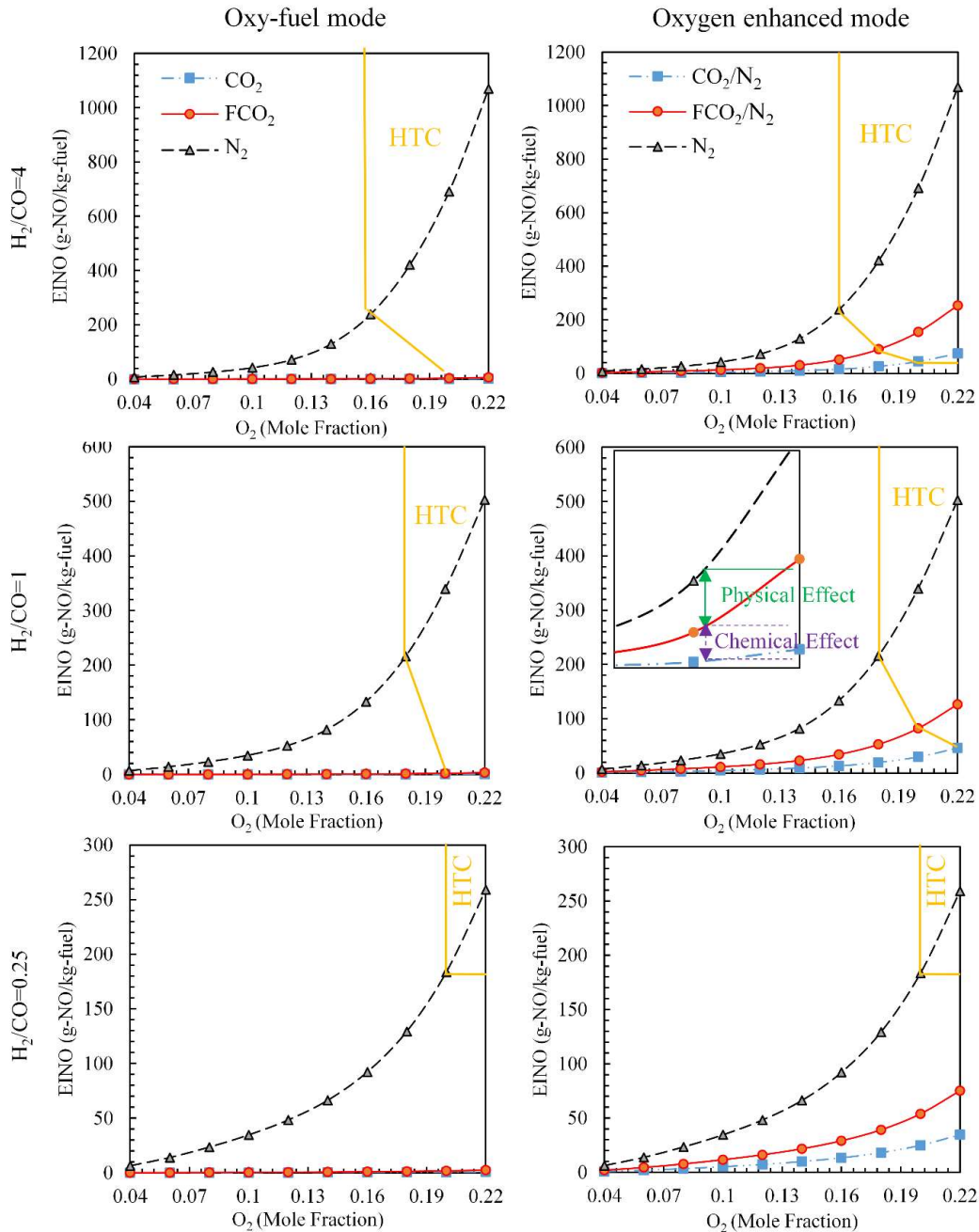


Figure 9- EINO versus O_2 mole fraction under two oxy-fuel and oxygen enhanced combustion modes in three different H_2/CO ratios

شکل ۹- تغییرات شاخص انتشار آلاینده NO بر حسب کسر مولی اکسیژن موجود در ساختار اکسیدکننده در دو حالت احتراقی

سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی در سه نسبت سوخت H_2/CO مختلف

در مقایسه با مطالعات انجام شده پیرامون سوخت متان که با جایگزینی CO_2 با N_2 ، اثرات شیمیایی در کاهش انتشار گونه NO نقش اصلی را بر عهده داشته، استفاده از سوخت گاز سنتز تحت احتراق اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن بیانگر غالب بودن اثرات فیزیکی در کاهش انتشار این گونه است. لازم به ذکر است که به طور کلی انتقال از احتراق سوخت-هوا به سوخت-اکسیژن با استفاده از سوخت گاز سنتز، سطح انتشار آلاینده NO را نسبت به انتقال از احتراق متان-هوا به متان-اکسیژن به میزان بسیار بیشتری (تحت شرایط عملکردی مشابه) کاهش می‌دهد.

آنالیز حساسیت واکنش‌های شیمیایی نسبت به تولید گونه NO برای دو کسر مولی ۶ و ۱۸٪ مربوط به گونه اکسیژن در ساختار اکسیدکننده ورودی، برای دو ترکیب سوخت گاز سنتز تحت شرایط اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن در شکل ۱۰ نمایش داده شده است. در حالت سطح پایین اکسیژن موجود در اکسیدکننده هوا، مکانیزم NNH سهمی به مراتب از سایر مکانیزم‌های انتشار آلاینده NO ایفا کرده و پس از آن مکانیزم حرارتی به ویژه در شرایط استفاده از این سوخت با ترکیب هیدروژن غنی، ریشه اصلی تولید NO است. در این حالت نیز واکنش R208 نقشی ویژه در تولید NO ایفا کرده که در این واکنش NNH با اتم اکسیژن ایجاد شده از طریق واکنش R38 در شرایط $\text{H}_2/\text{CO}=4$ و واکنش‌های R38 ، R3 و R4 برای سوخت گاز سنتز با ترکیب هیدروژن رقیق، واکنش داده و منجر به تشکیل NO می‌شود. در شرایط استفاده از CO_2 به جای N_2 تفاوت‌های فیزیکی و شیمیایی میان این دو گونه سبب می‌شود تا مسیرهای واکنشی تغییر قابل توجهی پیدا کرده، به گونه‌ای که از اثرات مکانیزم NNH کاسته و سهم مکانیزم N_2O -میانی به طور قابل ملاحظه‌ای تقویت می‌شود. به طور مشابه با بحث اثرات دمای اکسیدکننده ورودی، در این حالت نیز واکنش اصلی تولید آلاینده NO از طریق ریشه N_2O -میانی، واکنش R199 است که N_2O مورد نیاز برای آن از طریق واکنش‌های R183 و R185 تأمین می‌شود. همچنین هیدروژن مورد نیاز برای انجام واکنش R199 نیز از طریق سه واکنش R33 ، R35 و R36 با توجه به ترکیب سوخت گاز سنتز فراهم می‌شود.

افزایش کسر مولی اکسیژن موجود در ساختار اکسیدکننده، تغییرات قابل توجهی در مسیرهای واکنشی و در نتیجه مکانیزم‌های انتشار آلاینده NO ایفا می‌کند. افزایش غلظت O_2 موجود در ساختار اکسیدکننده، منجر به افزایش نرخ واکنش‌های شیمیایی و در نتیجه حرارت آزاد شده از فرآیند احتراق شده که نتیجه آن، دمای بیشینه احتراقی بالاتر است. افزایش دمای بیشینه احتراق عاملی برای افزایش انتشار آلاینده مذکور به وسیله مکانیزم حرارتی است. همان‌طور که در شکل ۱۰ مشاهده می‌شود، در شرایط نسبت سوخت H_2/CO برابر ۴، برای احتراق سوخت-هوا، مکانیزم حرارتی اصلی‌ترین عامل در تولید آلاینده NO است. با کاهش هیدروژن سوخت، اگرچه سهم مکانیزم حرارتی به شکل ویژه‌ای افزایش می‌یابد، اما همچنان مکانیزم NNH نقشی کلیدی در تشکیل آلاینده NO برعهده دارد. با جایگزینی CO_2 با N_2 درون ترکیب اکسیدکننده، مسیرهای واکنشی به سمتی پیش می‌روند که در شرایط سطح غلظت پایین اکسیژن ورودی (سطح رقیق‌سازی بالای مخلوط احتراقی)، دو مکانیزم NNH و N_2O -میانی تولیدکننده اصلی آلاینده NO بوده و در مقادیر اکسیژن بالای موجود در ساختار اکسیدکننده، سه مکانیزم NNH از طریق واکنش R208 ، مکانیزم N_2O -میانی از طریق واکنش R199 و مکانیزم حرارتی از طریق واکنش R178 مسئول تولید آلاینده NO هستند (برای شرایط نسبت سوخت H_2/CO برابر ۴، مکانیزم حرارتی بالاترین سهم و تحت شرایط نسبت سوخت H_2/CO برابر ۰/۲۵، مکانیزم NNH سهم اصلی را بر عهده دارد). با کاهش هیدروژن موجود در سوخت، اکسیژن لازم برای تولید NO از سه مکانیزم بیان شده، علاوه بر واکنش‌های ذکر شده از طریق واکنش R3 نیز تأمین می‌شود.

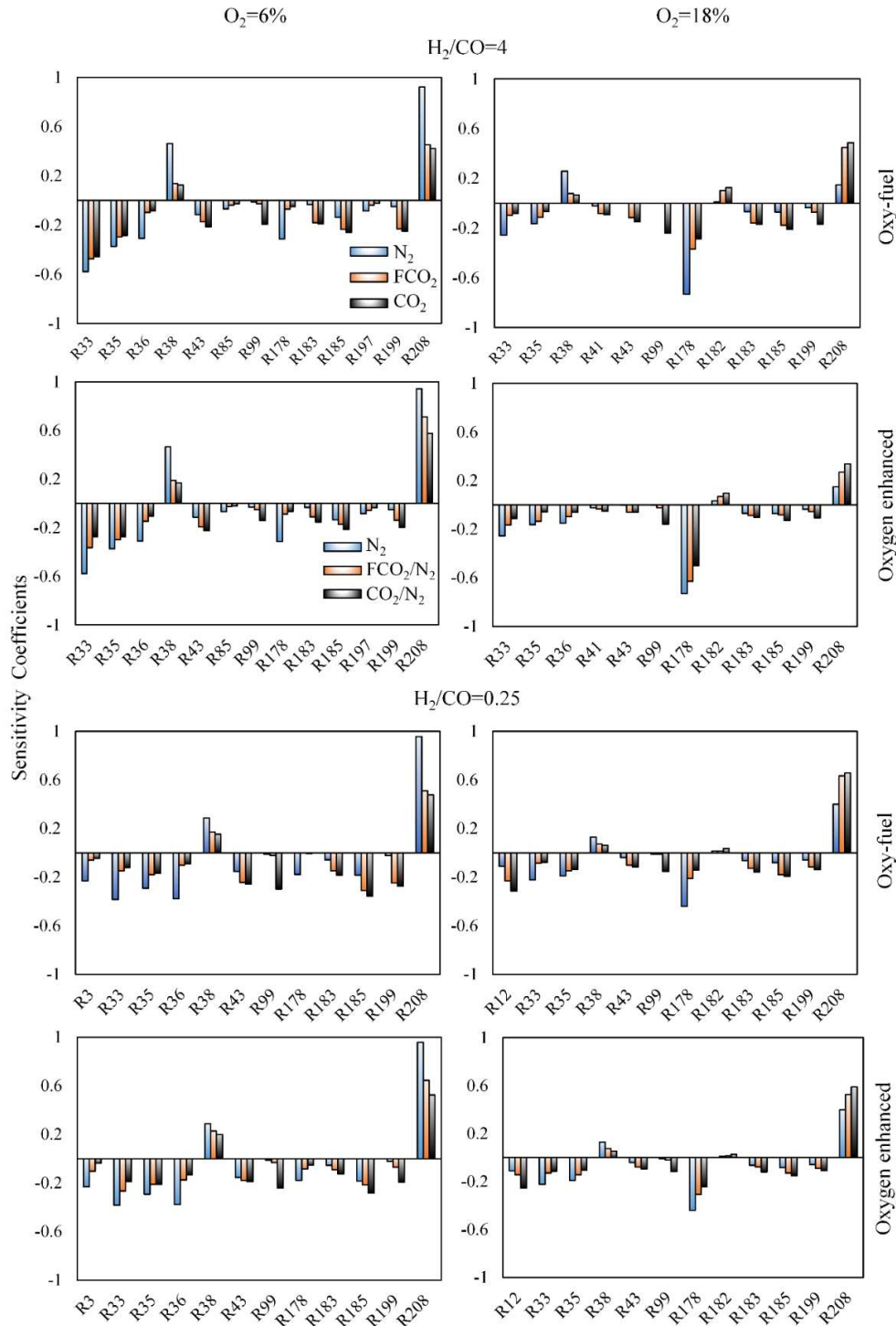


Figure 10- Sensitivity analysis of NO production for O_2 mole fraction of 6 and 18% under two oxy-fuel and oxygen enhanced combustion modes in two different H_2/CO ratios

شکل ۱۰- آنالیز حساسیت واکنش‌های شیمیایی نسبت به تولید آلاینده NO تحت کسرهای مولی ۶ و ۱۸٪ اکسیژن در ساختار اکسیدکننده برای دو حالت احتراقی اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن و دو نسبت سوخت H_2/CO مختلف

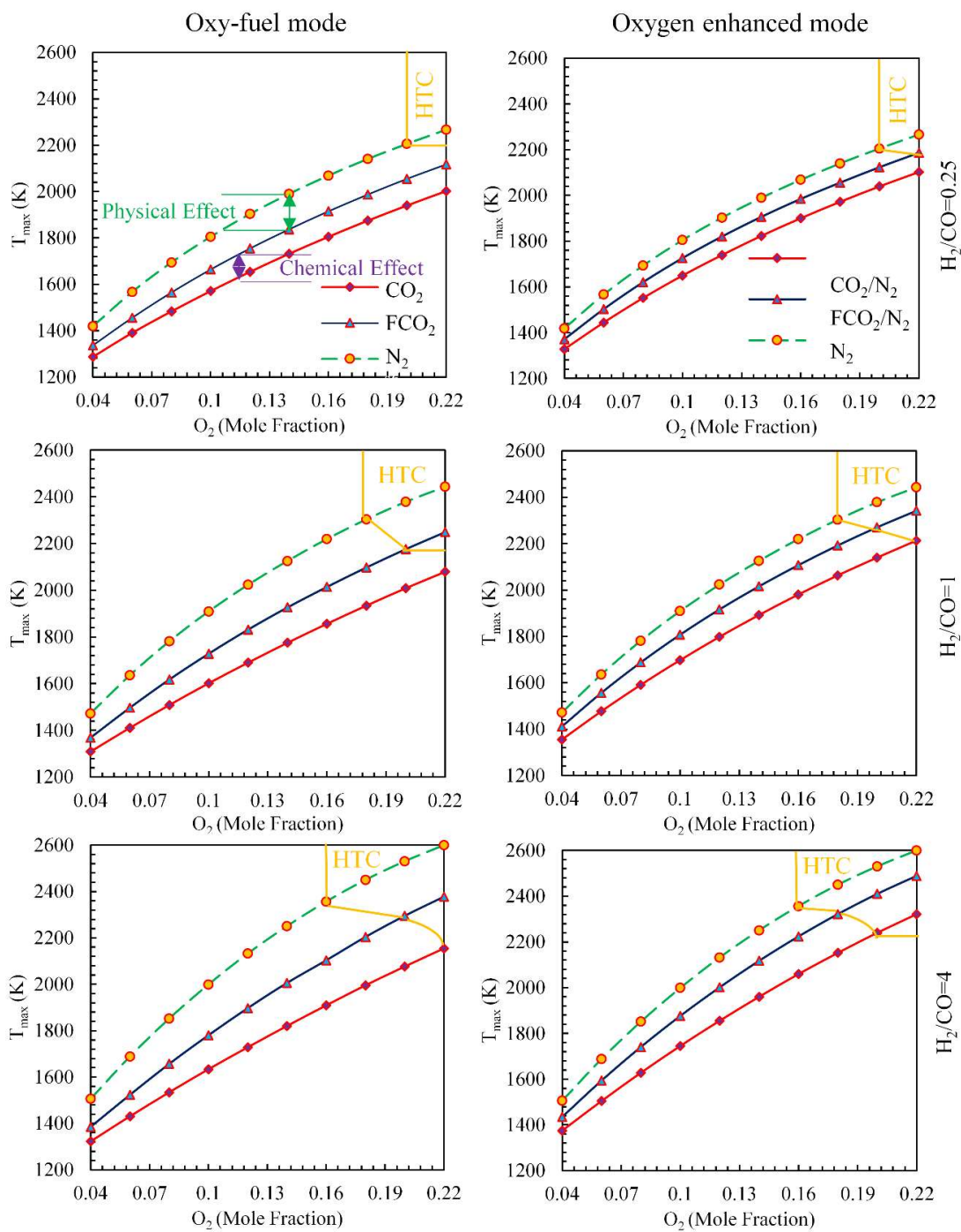


Figure 11- T_{max} in terms of different oxygen concentration for oxygen enhanced and oxy-fuel conditions and three different H_2/CO fuel ratio

شکل ۱۱- منحنی پیشینه دما بر حسب غلظت‌های مختلف اکسیژن برای شرایط اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن و سه نسبت سوخت متفاوت

در شکل ۱۱ تغییرات حداکثر دمای شعله را بر حسب کسر مولی اکسیژن در ترکیب اکسیدکننده برای شرایط اکسیژن غنی، سوخت-اکسیژن و سوخت-هوا برای نسبت سوخت H_2/CO برابر ۰/۲۵، ۱ و ۴ قابل ملاحظه است. تزریق اکسیژن اضافی منجر به ایجاد دمای شعله بالاتر در هر دو حالت اکسیژن غنی و سوخت-اکسیژن در تمام نسبت‌های H_2/CO شده است. دلیل اصلی این افزایش دما (که در سوخت گاز سنتز با سطح بالاتر هیدروژن عملی تر است)، رشد نرخ‌های واکنشی مربوط به حضور اکسیژن بیشتر در منطقه واکنش است. افزایش حداکثر دما در شرایط مختلف اکسیدکننده با تغییر رژیم احتراق از رژیم مایلد به رژیم دما بالا همراه است. این انتقال زمانی سریع‌تر رخ می‌دهد که H_2 بیشتری در سوخت یا N_2 بیشتر در ساختار اکسیدکننده وجود داشته باشد. مشابه تغییرات بررسی شده در بخش دمای ورودی اکسیدکننده، حداکثر دمای شعله در حالت سوخت-هوا بدست می‌آید. افزایش کسر مولی CO_2 با کاهش شدید حداکثر دمای شعله ناشی از تفاوت‌های فیزیکی و شیمیایی همراه است. ظرفیت حرارتی بالاتر CO_2 مهم‌ترین تفاوت فیزیکی است، در حالی که حضور CO_2 در واکنش‌های گرماگیر و واکنش‌های تجزیه‌ای قابل توجه‌ترین اثر شیمیایی است. این نتایج مستقل از ساختار مختلف سوخت گاز سنتز بوده و برای همه نسبت‌های H_2/CO معتبر است. در هر دو شرایط سوخت-اکسیژن و اکسیژن غنی، سهم تفاوت‌های فیزیکی و شیمیایی در تمام غلظت‌های گونه O_2 در ترکیب اکسیدکننده، تقریباً یکسان است. بررسی دقیق‌تر این موضوع نشان می‌دهد که در شرایط سوخت-اکسیژن، سهم اثرات شیمیایی کمی بیشتر از اثرات فیزیکی است، در حالی که در شرایط اکسیژن غنی، اثرات فیزیکی کمی مؤثرتر از اثرات شیمیایی است. کاهش نسبت H_2/CO در تغییر غلظت اکسیژن در ترکیب اکسیدکننده، بر خلاف نتایج بدست آمده در بخش تأثیرات دمای ورودی اکسیدکننده، منجر به ایجاد تغییرات تقریباً یکنواخت در دما برای تمامی حالات احتراقی تحت مطالعه شده است. برای مثال، حداکثر دمای احتراق در شرایط سوخت-هوا برای کسر مولی اکسیژن برابر ۰/۱۴ در نسبت سوخت H_2/CO برابر ۰/۲۵، ۱ و ۴ به ترتیب ۱۹۸۹، ۲۱۲۵ و ۲۲۵۱ کلوین است. این اعداد نشان دهنده افزایش تقریباً یکنواخت و خطی پارامتر بیشینه دمای شعله با افزایش نسبت H_2/CO است. یکی از عوامل اصلی در تقویت تفاوت‌های فیزیکی و شیمیایی، ترکیب گاز سنتز و به طور خاص، سطح H_2 در گاز سنتز است که این موضوع با بررسی اختلاف دمای حداکثر شعله در زمان استفاده از گونه‌های CO_2 ، FCO_2 و N_2 همراه با کاهش غلظت هیدروژن در ترکیب گاز سنتز مشخص می‌شود.

نتیجه‌گیری

در پژوهش جاری تأثیرات پارامترهای عملکردی کلیدی مختلفی بر روی انتشار آلاینده NO نظیر دمای ورودی اکسیدکننده (۹۰۰ الی ۲۳۰۰ کلوین)، غلظت اکسیژن در ترکیب اکسیدکننده (کسر مولی ۴ الی ۰/۲۲)، ترکیب مختلف سوخت (نسبت سوخت H_2/CO برابر ۱، ۰/۲۵ و ۴) و نرخ کرنش (۲۵ الی ۴۰۰ $(1/s)$) با بهره‌گیری از شعله نفوذی جریان متقابل و استفاده از سینتیک شیمیایی GRI3.0 بررسی شده است. در ادامه مهم‌ترین نتایج بدست آمده از تحقیق فعلی ارائه می‌شود.

۱- به دلیل مدت زمان اقامت پایین محصولات در مقادیر نرخ کرنش پایین، شاخص انتشار آلاینده NO نیز کاهش می‌یابد. مقدار بیشینه EINO در مقادیر نرخ کرنش بین ۵۰ تا ۷۵ $(1/s)$ مشاهده می‌شود. این مطلب بیانگر این نکته مهم است که در صورت تشکیل شعله پایدار تحت رژیم بدون شعله، بهره‌گیری از شرایط نرخ کرنش به اندازه کافی بالا یا به اندازه کافی پایین در دستیابی به شرایط مطلوب از نقطه نظر انتشار آلاینده NO کمک‌کننده خواهد بود و این مطلب مستقل از نسبت سوخت H_2/CO است.

۲- بررسی‌های صورت گرفته در زمینه تأثیر دمای ورودی اکسیدکننده بر انتشار آلاینده NO نشان از ارتباط مستقیم افزایش دما و افزایش میزان شاخص انتشار آلاینده NO است. آنالیز حساسیت صورت گرفته نیز نشان می‌دهد با افزایش دمای ورودی اکسیدکننده به خصوص در مقادیر بیش از ۱۸۰۰ کلوین، سهم عمده تولید آلاینده NO بر عهده مکانیزم حرارتی از طریق واکنش R178 بوده و این موضوع مستقل از ترکیب سوخت است.

۳- مقایسه بین شرایط احتراقی گاز سنتز-اکسیژن، اکسیژن غنی و سوخت-هوا نشان می‌دهد که شاخص انتشار آلاینده NO تحت شرایط سوخت-اکسیژن بیش از ۹۹ درصد و در شرایط اکسیژن غنی حدود ۹۰ درصد کمتر از شرایط سوخت-هوا است.
 ۴- در تمامی غلظت‌های اکسیژن در ترکیب اکسیدکننده، اثرات فیزیکی (بین ۷۰ تا ۹۰ درصد) عامل کنترل انتشار آلاینده NO بوده و اثرات شیمیایی همواره کمتر از ۳۰ درصد است و این موضوع در تمامی نسبت‌های سوخت H₂/CO معتبر است. آنالیز حساسیت واکنش‌های شیمیایی نیز مشخص نموده که در مقادیر بالای غلظت اکسیژن در ترکیب اکسیدکننده، سه مکانیزم N₂O-میانی از طریق واکنش R199، مکانیزم NNH از طریق واکنش R208 و مکانیزم حرارتی از طریق واکنش R178 نقش اصلی در تولید آلاینده NO را بر عهده دارند.

جدول علائم و نشانه‌ها

a	نرخ کرنش (یک بر ثانیه)
C _p	ظرفیت گرمایی ویژه (ژول بر کیلوگرم در کلوین)
h _k	آنتالپی گونه k (ژول)
MW _k	جرم مولکولی گونه k (گرم بر مول)
P _j	ضریب پیش‌نمایی آرنیوس برای واکنش j
T	دما (کلوین)
T _{ai}	دمای خود اشتعالی (کلوین)
T _{in}	دمای ورودی اکسیدکننده (کلوین)
U _k	سرعت گونه k (متر بر ثانیه)
x	مکان (سانتی‌متر)
X _k	کسر حجمی گونه k (درصد)
Y _k	کسر جرمی گونه k (درصد)

حروف یونانی

ρ	چگالی (کیلوگرم بر مترمکعب)
μ	لزجت دینامیکی (پاسکال ثانیه)
λ	ضریب هدایت حرارتی (وات بر متر در کلوین)
ω _k	نرخ تولید گونه k بر حسب مول (مول بر ثانیه)

عنوان فارسی

اختصار	عنوان لاتین	عنوان فارسی
EINO	NO Emission Index	شاخص انتشار آلاینده NO
HTC	High Temperature Combustion	رژیم احتراق دما بالا
MILD	Moderate or Intense Low Oxygen Dilution	رقیق‌سازی متوسط یا شدید اکسیژن اندک (رژیم احتراق بدون شعله)
-	Oxy-fuel mode	شرایط احتراقی سوخت-اکسیژن
-	Oxygen enhanced mode	شرایط احتراقی اکسیژن غنی

منابع

- [1] A. Shaker, E. E. Fordoei, and F. A. Boyaghchi, "Study of NO emission from CH₄-air, oxygen-enriched, and oxy-CH₄ combustion under HTC and MILD regimes: Impact of wall thermal condition in different oxidant temperature and dilution level," *Energy*, vol. 277, p. 127683, 2023.
- [2] K. Safer, M. Safer, F. Tabet, and A. Ouadha, "A numerical investigation of oxygen-enriched biogas counter-flow diffusion flames," *Combustion Science and Technology*, vol. 196, no. 8, pp. 1207-1226, 2024.
- [3] S. Zhao, H. Li, B. Wang, X. Yang, Y. Peng, H. Du, Y. Zhang, D. Han, and Z. Li, "Recent advances on syngas conversion targeting light olefins," *Fuel*, vol. 321, p. 124124, 2022.
- [4] V. G. Bui, T. M. T. Bui, Z. Huang, A. T. Hoang, W. Tarelko, X. M. Pham, and P. Q. P. Nguyen, "Flexible syngas-biogas-hydrogen fueling spark-ignition engine behaviors with optimized fuel compositions and control parameters," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 48, no. 18, pp. 6722-6737, 2023.
- [5] K.-T. Wu, H. Lee, C. Juch, H. Wan, H. Shim, B. Adams, and S. Chen, "Study of syngas co-firing and reburning in a coal fired boiler," *Fuel*, vol. 83, no. 14-15, pp. 1991-2000, 2004.
- [6] L. Chen and F. Battaglia, "The Effects of Fuel Mixtures in Nonpremixed Combustion for a Bluff-Body Flame," *Journal of Energy Resources Technology*, vol. 138, no. 2, 2016.
- [7] S. Li, X. Zhang, D. Zhong, F. Weng, S. Li, and M. Zhu, "Effects of inert dilution on the lean blowout characteristics of syngas flames," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 21, pp. 9075-9086, 2016.
- [8] N. Stylianidis and U. Azimov, "Reduced chemical kinetics mechanism for modelling of n-Heptane/syngas combustion with NO_x formation in a micro-pilot ignited dual fuel engine," *Fuel*, vol. 362, p. 130461, 2024.
- [9] S. Xu, Y. Tong, S. Jin, H. Ren, Y. Tu, S. Zhang, and H. Liu, "NO formation and reduction during methane/hydrogen MILD combustion over a wide range of hydrogen-blending ratios in a well-stirred reactor," *Fuel*, vol. 346, p. 128324, 2023.
- [10] A. Cavaliere and M. De Joannon, "Mild combustion," *Progress in Energy and Combustion science*, vol. 30, no. 4, pp. 329-366, 2004.
- [11] P. Li, J. Mi, B. Dally, F. Wang, L. Wang, Z. Liu, S. Chen, and C. Zheng, "Progress and recent trend in MILD combustion," *Science China Technological Sciences*, vol. 54, no. 2, pp. 255-269, 2011.
- [12] T. Hasegawa, S. Mochida, and A. Gupta, "Development of advanced industrial furnace using highly preheated combustion air," *Journal of propulsion and power*, vol. 18, no. 2, pp. 233-239, 2002.
- [13] M. De Joannon, G. Sorrentino, and A. Cavaliere, "MILD combustion in diffusion-controlled regimes of hot diluted fuel," *Combustion and Flame*, vol. 159, no. 5, pp. 1832-1839, 2012.
- [14] B. Dally, R. Craig, and J. Mi, "Dependence of flameless combustion on fuel-air injection pattern and their momentum ratio in a recuperative furnace," in *9th Asia-Pacific International Symposium on Combustion and Energy Utilization (02 Nov 2008-06 Nov 2008: Beijing, China)*, 2008.
- [15] P. Li, J. Mi, B. Dally, R. Craig, and F. Wang, "Effect of equivalence ratio and reactants mixing pattern on flameless combustion," in *Chinese Society of Engineering Thermophysics Conference, Guang Zhou: Chinese Society of Engineering Thermophysics*, 2010.
- [16] J. Mi, P. Li, B. B. Dally, and R. A. Craig, "Importance of initial momentum rate and air-fuel premixing on moderate or intense low oxygen dilution (MILD) combustion in a recuperative furnace," *Energy & Fuels*, vol. 23, no. 11, pp. 5349-5356, 2009.
- [17] A. Shaker, "Numerical simulation of the syngas flame structure under air-fuel, oxygen enriched, and oxy-fuel regimes with flameless combustion: the impacts of fuel composition, preheating temperature, and oxygen mole fraction," *Fuel and Combustion*, vol. 15, no. 4, pp. 61-82, 2023.
- [18] M. Huang, H. Deng, Y. Liu, B. Zhang, S. Cheng, X. Zhang, and F. Zhang, "Effect of fuel type on the MILD combustion of syngas," *Fuel*, vol. 281, p. 118509, 2020.
- [19] A. Shaker, S. A. Hashemi, and E. E. Fordoei, "Numerical study of the O₂/CO₂, O₂/CO₂/N₂, and O₂/N₂-syngas MILD combustion: Effects of oxidant temperature, O₂ mole fraction, and fuel blends," *International Journal of Hydrogen Energy*, 2023.
- [20] S. M. Mousavi, B. J. Lee, J. Kim, F. Sotoudeh, B. Chun, D. Jun, N. Karimi, and J. A. Esfahani, "On the effects of adding syngas to an ammonia-MILD combustion regime—A computational study of the reaction zone structure," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 52, pp. 226-240, 2024.
- [21] G. Shi, P. Li, F. Hu, and Z. Liu, "NO mechanisms of syngas MILD combustion diluted with N₂, CO₂, and H₂O," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 47, no. 37, pp. 16649-16664, 2022.
- [22] A. Dolai and R. Ravikrishna, "Assessment of MILD combustion in co/counter-swirl configuration using syngas as a fuel," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 49, pp. 1160-1175, 2024.

- [23] S. Boussetla, A. Mameri, and A. Hadeif, "NO emission from non-premixed MILD combustion of biogas-syngas mixtures in opposed jet configuration," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 46, no. 75, pp. 37641-37655, 2021.
- [24] A. Lutz, R. Kee, J. Grcar, and F. Rupley, "A Fortran Program for computing opposed flow diffusion flames, report No.," *SAND96-8243, Sandia National Laboratories*, 1996.
- [25] J. Kee Robert, M. Rupley Fran, M. J. A. Meeks Ellen, and A. Chemkin III, "A fortran chemical kinetics package for the analysis of gas phase chemical and plasma kinetics," *Sandia National Laboratories*, 1996.
- [26] A. Sahu, S. Krishna, and R. Ravikrishna, "Quantitative OH measurements and numerical investigation of H₂/CO kinetics in syngas-air counterflow diffusion flames," *Fuel*, vol. 193, pp. 119-133, 2017.
- [27] A. B. Sahu and R. Ravikrishna, "Quantitative LIF measurements and kinetics assessment of NO formation in H₂/CO syngas-air counterflow diffusion flames," *Combustion and Flame*, vol. 173, pp. 208-228, 2016.
- [28] A. Mameri, S. Boussetla, R. Belalmi, and Z. Aouachria, "Combustion characterization of the mixtures biogas-syngas, strain rate and ambient pressure effects," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 44, no. 39, pp. 22478-22491, 2019.
- [29] G. P. Smith, "GRI-3.0," http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, 2000.
- [30] U. o. C. a. S. Diego, "Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications," ed: Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), 2016.
- [31] Y. Zhang, O. Mathieu, E. L. Petersen, G. Bourque, and H. J. Curran, "Assessing the predictions of a NO_x kinetic mechanism on recent hydrogen and syngas experimental data," *Combustion and Flame*, vol. 182, pp. 122-141, 2017.
- [32] G. Bagheri, E. Ranzi, M. Pelucchi, A. Parente, A. Frassoldati, and T. Faravelli, "Comprehensive kinetic study of combustion technologies for low environmental impact: MILD and OXY-fuel combustion of methane," *Combustion and flame*, vol. 212, pp. 142-155, 2020.
- [33] E. Ranzi, C. Cavallotti, A. Cuoci, A. Frassoldati, M. Pelucchi, and T. Faravelli, "New reaction classes in the kinetic modeling of low temperature oxidation of n-alkanes," *Combustion and flame*, vol. 162, no. 5, pp. 1679-1691, 2015.
- [34] E. Ranzi, A. Frassoldati, A. Stagni, M. Pelucchi, A. Cuoci, and T. Faravelli, "Reduced kinetic schemes of complex reaction systems: fossil and biomass-derived transportation fuels," *International Journal of Chemical Kinetics*, vol. 46, no. 9, pp. 512-542, 2014.
- [35] Y. Song, L. Marrodán, N. Vin, O. Herbinet, E. Assaf, C. Fittschen, A. Stagni, T. Faravelli, M. U. Alzueta, and F. Battin-Leclerc, "The sensitizing effects of NO₂ and NO on methane low temperature oxidation in a jet stirred reactor," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 37, no. 1, pp. 667-675, 2019.
- [36] T. Takeno and M. Nishioka, "Species conservation and emission indices for flames described by similarity solutions," *Combustion and flame*, vol. 92, no. 4, pp. 465-468, 1993.
- [37] E. E. Fordoei and K. Mazaheri, "Effects of preheating temperature and dilution level of oxidizer, fuel composition and strain rate on NO emission characteristics in the syngas moderate or intense low oxygen dilution (MILD) combustion," *Fuel*, vol. 285, p. 119118, 2021.
- [38] K.-P. Cheong, G. Wang, J. Mi, B. Wang, R. Zhu, and W. Ren, "Premixed MILD combustion of propane in a cylindrical furnace with a single jet burner: combustion and emission characteristics," *Energy & fuels*, vol. 32, no. 8, pp. 8817-8829, 2018.

English Abstract

Study of NO emission in syngas flameless combustion: The effect of inlet temperature, oxygen concentration, syngas composition and strain rate parameters

Ahmad Shaker¹, Seyed Abdolmahdi Hashemi^{2*}, Esmail Ebrahimi³

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

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

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

*Corresponding author

(Received: 2024/09/13, Received in revised form: 2024/10/21, Accepted: 2024/11/14)

The aim of the present paper is to investigate the effects of various key performance parameters in syngas fuel combustion on NO pollutant emission, such as oxidant inlet temperature, oxygen concentration in oxidant composition, different fuel composition, and strain rate under oxy-fuel, oxygen enhanced and air-fuel conditions. The required modeling has been implemented using the counter flow flame and GRI3.0 chemical kinetics. In order to evaluate the contribution of chemical and physical effects caused by replacing CO₂ with N₂, the neutral species FCO₂ has been used with the two conditions of not participating in chemical reactions and also having the same physical properties as CO₂. In low temperature combustion, the EINO is mostly the same when using air and pure oxygen as a oxidant, while with the increase of flame temperature to more than 1800 K, EINO increases significantly, especially through the thermal mechanism. The comparison between air-fuel, oxygen enhanced, and oxy-fuel combustions indicates that the EINO under oxygen enhanced conditions is about 90% and under oxy-fuel conditions is more than 99% lower than air-fuel conditions. The hydrogen-rich condition has reinforced the N₂O-intermediate mechanism, especially under oxy-fuel condition, mainly through the R199 reaction in the formation of NO pollutant. Investigations illustrate that at high strain rates due to the low residence time of the products, the level of EINO also decreases.

Keywords: NO emission, Syngas composition, Oxidant inlet temperature, Strain rate, Sensitivity analysis.