

Numerical study on the effect of inlet geometry on stability and thermal conditions in ammonia-methane combustion in a furnace with a non-premixed burner

Seyed Abdolmehdi Hashemi¹ , Amir Zamani Sheshkal², and Esmail Ebrahimi Fordoei³

¹ **Corresponding author**, Department of Mechanical Engineering, Kashan University, Isfahan, Iran, Email: hashemi@kashanu.ac.ir

² Department of Mechanical Engineering, Kashan University, Isfahan, Iran. Email: amir68.zamani@gmail.com

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

ARTICLE INFO

Article type

Research Article

Article history

Received 2026.02.06

Received in revised form: 2026.03.18

Accepted: 2026.03.25

Available online: 2026.03.27

Keywords

Ammonia-methane combustion

Flame stability

Thermal condition

Non-premixed burner

ABSTRACT

The aim of the present study is to investigate the effect of inlet geometry on thermal conditions, flame structure, and the stable flame formation limit in ammonia-methane combustion in a furnace with a non-premixed burner. Variations in fuel inlet diameter, air inlet diameter, and the distance between the air and fuel inlets are considered as the parameters related to inlet geometry. For this purpose, a numerical study has been conducted using the Reynolds stress turbulence model, the eddy dissipation concept combustion model, and KAUST ammonia-methane chemical kinetics, while also considering the discrete ordinate radiation model. The results show that increasing the mass fraction of ammonia in the fuel leads to a decrease in the maximum flame temperature, fundamental changes in flame structure and volume, as well as alterations in the stable flame formation limit. Among the geometric parameters investigated, decreasing the distance between the fuel and air inlets, decreasing the fuel inlet diameter, and finally decreasing the air inlet diameter led to improved stable combustion conditions for the burner and also create thermal conditions similar to those of pure methane combustion within the combustion chamber, respectively. The main effect of changing the inlet diameters is on the recirculation rate of combustion products into the unburned mixture and the inlet shear layer flow, whereas the greatest effect of ammonia is on altering the reaction pathways of the combustion process.

Introduction

Global warming has made it necessary to replace fossil fuels with intermittent renewable energy resources, rendering chemical storage—especially via carbon-free carriers such as ammonia—more cost-effective than batteries. With its high volumetric energy density and lower production cost, ammonia is considered a suitable option for hydrogen transport and storage; however, its main challenge is unstable combustion. Ariemna et al. showed that adding ammonia to methane severely narrows the flammability range and lowers the upper equivalence ratio limit, while Zhenhua et al. introduced oxygen-enriched combustion as an effective strategy to improve the stability of ammonia flames. Studies by Coulson and Najafi also indicate flame movement downstream and blow-off at high ammonia mole fractions, attributed to its chemical effects. Adding hydrogen to ammonia enhances flame speed but leads to a significant increase in NO emissions and a narrow operating window, and Li et al. identified the key exothermic reactions in this process. In this context, a numerical study has been conducted on the Huazhong University furnace with a non-premixed burner for methane-ammonia blended fuel. The objective is to investigate the effects of the inlet diameter of fuel and air nozzles and the distance between them on thermal performance and flame structure. To this end, temperature distribution and hydroxyl radical (OH) distribution are analyzed to determine the stable flame formation range within the furnace.

Geometry and boundary conditions

Figure 1 shows the Huazhong University combustion furnace. Fuel enters via a central 5 mm diameter nozzle, air through an annulus (inner diameter 7 mm, outer diameter 17 mm). The furnace is 600 mm long with a 250 mm diameter, and its exhaust stack includes a 50-mm inclined section followed by a straight section (length 50 mm, radius 25 mm). The methane as fuel and air as oxidant are introduced to the burner with velocity of 14.2 and 16.37 m/s.

Cite This Paper:

Zamani Sheshkal, Amir., Hashemi, Seyed Abdolmehdi., & Ebrahimi Fordoei, Esmail. (2026). Numerical study on the effect of inlet geometry on stability and thermal conditions in ammonia-methane combustion in a furnace with a non-premixed burner. *Fuel and Combustion*, 19 (1), 24-55. <http://doi.org/10.22034/jfnc.2026.592543.1465> (In Persian)

© The author(s) retain the copyright.

Publisher: [Iranian Combustion Institute \(ICI\)](http://www.jfnc.ir).

ارجاع دهی به این مقاله:



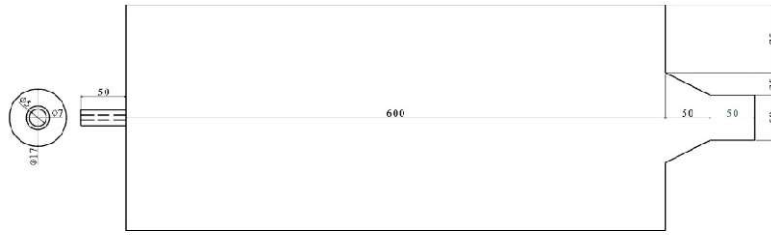


Figure 1- Geometry and dimensions of furnace and burner (dimensions in mm)

Numerical solution setup

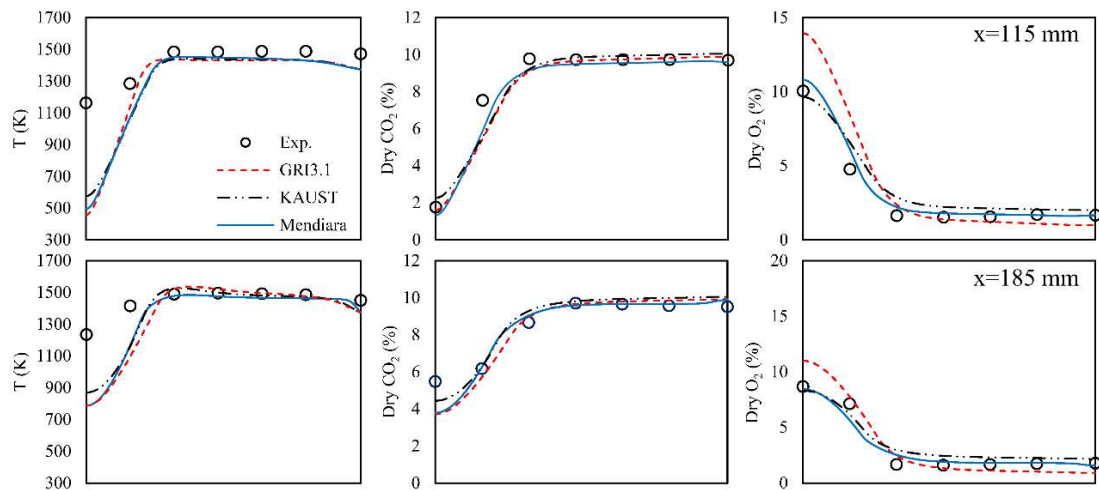
RANS simulation is used by the RSM turbulence model, EDC for combustion, and the DO model for radiation, with KAUST mechanism. The numerical simulations use the coupled algorithm for pressure-velocity coupling to accelerate convergence. Diffusion terms are discretized via central differencing, while convection terms employ the second-order upwind scheme. Convergence is verified by two criteria: (i) residuals below 10^{-6} for the energy equation and 10^{-5} for all other equations, and (ii) less than 0.1% variation in temperature and OH radical concentration at the furnace outlet over 100 consecutive iterations.

Numerical modeling conditions

The baseline geometry is the original experimental one. Fuel/air nozzle diameters and their spacing are varied, both increased and decreased relative to the baseline, while all other dimensions remain fixed. For each geometry, the fuel composition varies from pure methane to methane-ammonia blends with up to 90% ammonia mass fraction.

Results

Grid independence was verified using four meshes and the results show that mesh with the 26780 cells yielding grid-independent results. Validation of turbulence models, wall functions, and combustion models showed that the RSM turbulence model, Wolfshtein's wall function, and the EDC model provide high accuracy [21, 22]. Given the critical role of chemical kinetics in ammonia combustion, three mechanisms—GRI3.0, Mendiara, and KAUST were compared. Figure 2 indicate that the KAUST mechanism, with more accurate Arrhenius coefficients, provides best predicts temperature and CO_2 and O_2 dry mole fractions.

Figure 2- Validation of radial distribution of temperature, O_2 and CO_2 dry mole fractions for different chemical kinetics

Effect on inlet geometries on thermal conditions

Figure 3 show that decreasing the fuel or air nozzle diameters (at constant inlet velocity) raises the peak flame temperature by reducing penetration and dilution, whereas increasing these diameters lowers the peak temperature by lengthening the cold inlet region and enhancing product recirculation. Increasing the ammonia mass fraction also reduces the peak temperature due to lower heating value and reaction rates, with a sharper drop above 50%

mass fraction. In both cases, increasing the air inlet diameter and ammonia fraction promotes a more uniform temperature distribution and eliminates hot spots within the combustion chamber. Overall, adjustments to the inlet geometry can compensate for the temperature drop caused by ammonia addition and achieve favorable thermal conditions. These findings highlight the critical role of burner geometry in developing ammonia-blended fuel combustion.

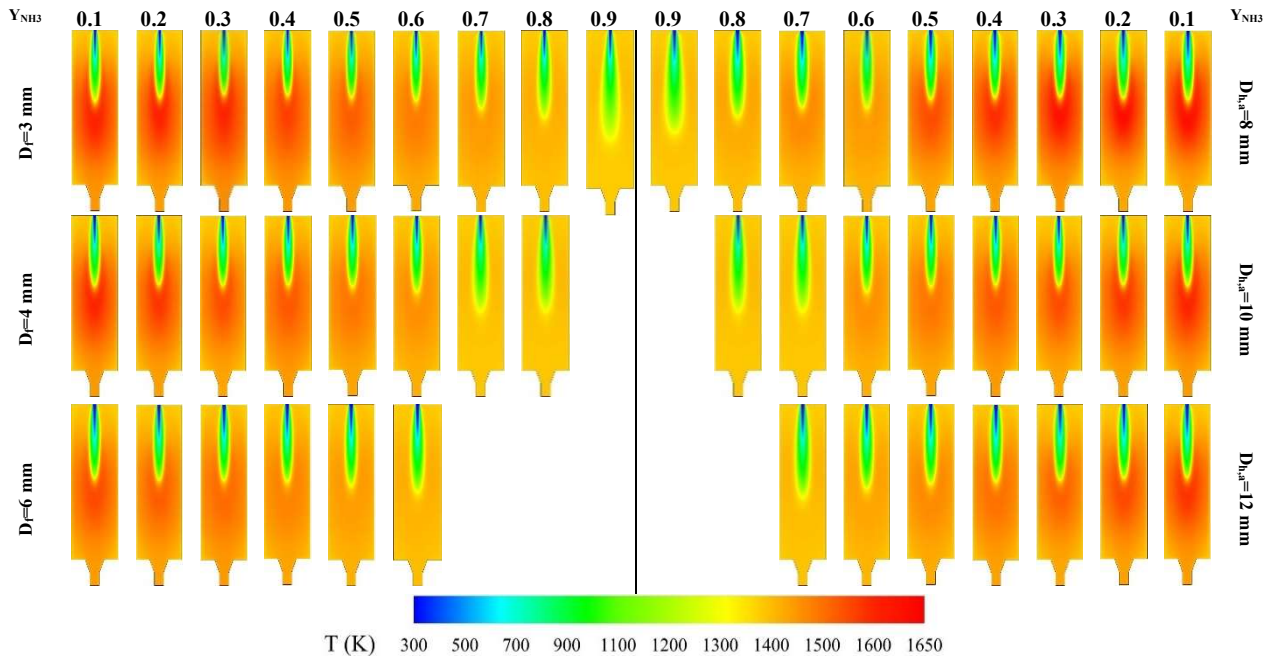


Figure 3- Effect of air and fuel nozzle diameter on the thermal performance of methane-ammonia non-premixed combustion

Effect on inlet geometries on flame stability and structure

Increasing the air inlet diameter (at constant velocity) raises airflow and recirculation, making dilution outweigh preheating, thus reducing OH radical levels and causing flame blow-off at lower ammonia mass fractions (for diameters of 8, 10, and 12 mm, blow-off occurs at fractions of 0.8, 0.7, and 0.6, respectively). Overall, both larger air diameter and increased nozzle spacing reduce chemical reaction rates primarily through enhanced dilution of the unburned mixture by combustion products.

Conclusion

Numerical modeling of the Huazhong furnace with a non-premixed burner shows that adding ammonia to methane reduces chamber temperature and alters the thermal pattern. This fuel modification transforms the flame structure and significantly narrows the stable flame formation range. Investigating three geometric parameters (fuel nozzle diameter, air hydraulic diameter, and nozzle spacing) reveals that reducing these dimensions expands the stable operating range for higher ammonia mass fractions. Thus, adjusting these three geometric parameters provides a key solution to achieve thermal conditions similar to pure methane combustion, facilitating the replacement of industrial burners with methane-ammonia blended fuel.

CRedit Author Statement

All authors contributed equally to the conceptualization of the article and writing of the original and subsequent drafts.

Data Availability Statement

Not applicable.

Conflict of Interest

Authors declare no conflict of interest.

References

- [1] J. K. Swim, R. Aviste, M. L. Lengieza, and C. J. Fasano, "OK Boomer: A decade of generational differences in feelings about climate change," *Global Environmental Change*, vol. 73, p. 102479, 2022.
- [2] G. B. Ariemma, G. Sorrentino, R. Ragucci, M. de Joannon, and P. Sabia, "Ammonia/Methane combustion: stability and NOx emissions," *Combustion and Flame*, vol. 241, p. 112071, 2022.
- [3] Z. An, R. Wang, R. Mao, J. Xing, M. Zhang, Z. X. Chen, and R. Kurose, "Flame stability and emission characteristics of oxygen-enriched ammonia combustion in a swirl combustor," *Energy*, vol. 324, p. 135829, 2025.
- [4] S. Colson, M. Kuhni, A. Hayakawa, H. Kobayashi, C. Galizzi, and D. Escudié, "Stabilization mechanisms of an ammonia/methane non-premixed jet flame up to liftoff", *Combustion and Flame*, vol. 234, p. 111657, 2021.
- [5] S. N. Najafi, A. Mokhov, and H. Levinsky, "Investigation of the stability, radiation, and structure of laminar coflow diffusion flames of CH₄/NH₃ mixtures," *Combustion and Flame*, vol. 244, p. 112282, 2022.
- [6] J. Li, H. Huang, L. Deng, Z. He, Y. Osaka, and N. Kobayashi, "Effect of hydrogen addition on combustion and heat release characteristics of ammonia flame," *Energy*, vol. 175, pp. 604–617, 2019.
- [7] S. Xu, Z. Tian, Y. Chen, S. Liang, Y. Tu, and H. Liu, "Effect of hydrogen-blending ratio and wall temperature on establishment, NO formation, and heat transfer of hydrogen-enriched methane MILD combustion," *Fuel*, vol. 369, p. 131787, 2024.
- [8] S. Xu, Z. Tian, Q. Dou, Y. Tu, Y. Fu, and H. Liu, "Performance improvement of methane oxy-MILD combustion with high initial oxygen contents using a novel non-premixed oxygen/recycled flue gas jet burner," *Energy & Fuels*, vol. 38, no. 4, pp. 3382–3398, 2024.
- [10] P. Glarborg, J. A. Miller, B. Ruscic, and S. J. Klippenstein, "Modeling nitrogen chemistry in combustion," *Progress in energy and combustion science*, vol. 67, pp. 31–68, 2018.



مطالعه عددی تأثیر هندسه ورودی بر پایداری و شرایط حرارتی در احتراق آمونیاک-متان در یک کوره با مشعل غیرپیش آمیخته

سید عبدالمهدی هاشمی^۱، امیر زمانی ششکل^{۲*}، اسماعیل ابراهیمی فردویی^۳

^۱ دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران، hashemi@kashanu.ac.ir

^۲ دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران، amir68.zamani@gmail.com

^۳ گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه تفرش، تفرش، ایران، ebrahimifordoei@tafreshu.ac.ir

اطلاعات مقاله	چکیده
نوع مقاله	هدف مطالعه حاضر بررسی تأثیر هندسه ورودی روی شرایط حرارتی، ساختار شعله و محدوده تشکیل شعله پایدار در احتراق آمونیاک-متان در کوره‌ای با مشعل غیرپیش آمیخته است. تغییرات قطر ورودی سوخت، ورودی هوا و فاصله میان ورودی هوا و سوخت به عنوان پارامترهای مرتبط با هندسه ورودی در نظر گرفته شده‌اند. بدین منظور مطالعه عددی با استفاده از مدل آشفتگی تنش رینولدز، مدل احتراقی مفهوم اتلاف گردابه و استفاده از سینتیک شیمیایی آمونیاک-متان کاست با در نظر گرفتن مدل تشعشعی فاز گسسته انجام شده است. نتایج بررسی نشان می‌دهند که افزایش کسر جرمی آمونیاک درون سوخت منجر به کاهش بیشینه دمای شعله، تغییرات اساسی در ساختار و حجم شعله و همچنین محدوده تشکیل شعله پایدار می‌شود. در میان پارامترهای هندسی مورد بررسی، به ترتیب کاهش فاصله میان ورودی سوخت و هوا، کاهش قطر ورودی سوخت و در نهایت کاهش قطر ورودی هوا منجر به بهبود ایجاد شرایط پایدار احتراقی برای مشعل و همچنین ایجاد شرایط حرارتی مشابه با احتراق متان خالص درون محفظه احتراق می‌شوند. تأثیر اصلی تغییر قطرهای ورودی بر میزان بازچرخش محصولات احتراق درون مخلوط نسوخته و جریان لایه برشی ورودی است در حالی که بیشترین تأثیر آمونیاک در تغییر در مسیرهای واکنشی فرایند احتراق است.
مقاله پژوهشی	
تاریخچه مقاله	
تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۱۱/۱۷	
تاریخ بازنگری: ۱۴۰۴/۱۲/۲۷	
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۱/۰۵	
تاریخ انتشار: ۱۴۰۵/۰۱/۰۷	
کلیدواژه‌ها:	
احتراق آمونیاک-متان	
پایداری شعله	
شرایط حرارتی	
مشعل غیرپیش آمیخته	

مقدمه

گرمایش جهانی ناشی از انتشار گازهای گلخانه‌ای، به یکی از بزرگ‌ترین چالش‌های بشر در قرن بیست و یکم تبدیل شده است [۱، ۲]. برای دستیابی به اهداف کاهش انتشار گازهای گلخانه‌ای ضروری است که درصد قابل توجهی از سوخت‌های فسیلی به عنوان منبع اصلی تولید گازهای گلخانه‌ای با منابع انرژی تجدیدپذیر جایگزین شود. تولید انرژی از اکثر منابع انرژی تجدیدپذیر مانند باد، موج، جزر و مد و خورشیدی معمولاً غیر پیوسته و ناپایدار است، بنابراین ذخیره انرژی در باتری‌ها یا به صورت شیمیایی برای کاهش اثرات نوسانات تولید انرژی لازم است. با این حال، ذخیره انرژی به صورت شیمیایی از نظر اقتصادی مقرون به صرفه‌تر از باتری‌ها است و همچنین امکان جایگزینی سوخت‌های فسیلی با سوخت‌های بدون کربن مانند هیدروژن را فراهم می‌کند [۳]. هیدروژن به دلیل ماهیت بدون کربن خود به طور گسترده به عنوان یک منبع انرژی تجدیدپذیر امیدبخش شناخته می‌شود [۴]. آمونیاک نیز فاقد کربن بوده و اخیراً به عنوان یک حامل مناسب هیدروژن یا محیط ذخیره سازی هیدروژن در سامانه‌های انرژی هیدروژنی مورد توجه قرار گرفته است [۵، ۶، ۷]. از جمله مزایای احتراق آمونیاک می‌توان به نقش آن به عنوان حامل هیدروژن،

Cite This Paper:

Zamani Sheshkal, Amir., Hashemi, Seyed Abdolmehdi., & Ebrahimi Fordoei, Esmaeil. (2026). Numerical study on the effect of inlet geometry on stability and thermal conditions in ammonia-methane combustion in a furnace with a non-premixed burner. *Fuel and Combustion*, 19 (1), 24-55. <http://doi.org/10.22034/jfnc.2026.592543.1465> (In Persian)

© The author(s) retain the copyright.

Publisher: [Iranian Combustion Institute \(ICI\)](http://www.iranian-combustion-institute.com).



دسترس‌پذیری گسترده، قابلیت مطلوب برای ذخیره‌سازی و حمل‌ونقل و هزینه پایین تولید آن نسبت به هیدروژن به ازای واحد مشخصی از انرژی ذخیره شده اشاره کرد [۸]. از مزایای دیگر این سوخت می‌توان به چگالی انرژی حجمی بالاتر، سهولت بیشتر و گستردگی بالاتر در تولید، جابه‌جایی و توزیع، و همچنین توجیه‌پذیری تجاری مناسب‌تری اشاره کرد.

علی‌رغم مزایای گسترده در ارتباط با احتراق آمونیاک چالش‌های موجود در ارتباط با آن یکی از موانع اصلی استفاده فراگیر آن در کاربردهای مختلف بوده است. از جمله چالش‌های اصلی احتراق آمونیاک می‌توان احتراق ناپایدار اشاره کرد. این چالش‌ها سبب شده در سال‌های اخیر مطالعات گسترده‌ای روی احتراق آمونیاک انجام شود. آریمن و همکاران [۹] در مطالعه‌ای با استفاده از واکنشگاه کاملاً مخلوط به بررسی پایداری شعله و انتشار آلاینده ناکس در احتراق آمونیاک، متان و ترکیب آمونیاک-متان به عنوان سوخت پرداختند. در این مطالعه بررسی‌ها تحت رژیم بدون شعله انجام شده و نتایج نشان می‌دهند در شرایطی که محدوده اشتعال‌پذیری برای متان خالص به عنوان سوخت نسبت هم‌ارزی ۰/۴۸ تا ۲/۵ است، جایگزینی آمونیاک خالص این محدوده را به ۰/۶ تا ۱/۵ کاهش می‌دهد. همچنین استفاده از ترکیب متان و آمونیاک به عنوان سوخت نتایج جالبی را نشان می‌دهد. ترکیب آمونیاک با سوخت تا حدود نسبت مولی ۷۰ درصدی متان و ۳۰ درصدی آمونیاک تأثیر قابل توجهی بر حد بالای نسبت هم‌ارزی تشکیل احتراق پایدار تأثیر نداشته و با افزایش بیشتر آمونیاک در مخلوط سوخت حد خاموشی سوخت-غنی به سرعت کاهش می‌یابد. در حالی که برای حد پایین تشکیل شعله پایدار ترکیب تقریباً مساوی از آمونیاک و متان تأثیر قابل ملاحظه‌ای بر تشکیل شعله پایدار نداشته و افزودن آمونیاک بیشتر به سوخت منجر به افزایش قابل توجه در نسبت هم‌ارزی تشکیل شعله پایدار می‌شود. پایداری شعله در مطالعه‌ای تجربی و عددی توسط ژنوها و همکاران [۱۰] تحت شرایط اکسیژن غنی برای مشعل چرخشی آزمایشگاهی انجام پذیرفت. مطالعه تجربی و عددی برای کسر مولی اکسیژن ۳ تا ۲۱ درصد تحت نسبت هم‌ارزی ۰/۸ انجام شده است. نتایج نشان می‌دهند که احتراق غنی‌شده با اکسیژن یک راهکار مؤثر برای بهبود پایداری شعله‌های آمونیاکی است. افزایش کسر مولی اکسیژن باعث افزایش قابل توجه نرخ آزادسازی گرما و نرخ خاموشی شعله می‌شود. افزایش کسر مولی اکسیژن موجب افزایش کشیدگی شعله شده که اثر آن در بهبود محدوده خاموشی شعله غالب است. این افزایش به معنای بهبود پایداری شعله و کاهش خطر خاموشی در شرایط عملکردی مختلف است. کولسون و همکاران [۱۱] اثر آمونیاک بر پایداری شعله جت متان را با استفاده از شعله جت غیرپیش‌آمیخته برای مشاهده پایداری شعله، فعل و انفعالات شیمیایی و نحوه تأثیر افزودن آمونیاک بر پایداری شعله چسبیده به مشعل و شعله برخاسته مورد بررسی قرار دادند. در این مطالعه برای هر یک از مخلوط‌های انتخاب شده سرعت جت به تدریج افزایش یافت و سرعت جریان هم‌سوی سوخت و هوا ثابت نگه داشته شده است. مطابق یافته‌های این پژوهش، برای شعله جت غیر پیش مخلوط متان می‌توان مشاهده کرد که با اضافه شدن آمونیاک موقعیت شعله به سمت جت و پایین دست حرکت می‌کند. در واقع افزایش کسر مخلوط استوکیومتری، شعله را به سمت سوخت هدایت می‌کند، جایی که کسر مخلوط برای گسترش آن مطلوب‌تر است و کاهش واکنش‌پذیری مخلوط به دلیل اضافه شدن آمونیاک، منجر به پایداری شعله در قسمت پایین دست می‌شود. نجفی و همکاران [۱۲] در مطالعه‌ای تجربی به بررسی پایداری ساختار شعله‌های آرام نفوذی با جریان هم‌راستای متان-آمونیاک و هوا پرداختند. همچنین از ترکیب متان-نیتروژن به منظور تفکیک اثرات شیمیایی NH_3 از اثرات رقیق‌سازی سوخت استفاده شده است. برای شرایط استفاده شده در مطالعه تجربی صورت گرفته، شعله‌های پایدار زمانی به دست آمدند که مقدار کسر مولی آمونیاک در سوخت از ۰ تا ۰/۴۶ متغیر است. افزایش بیشتر کسر مولی آمونیاک منجر به خاموش شدن شعله می‌شود؛ در حالی که برای ترکیب سوخت متان-نیتروژن تا متادیر کسر مولی نیتروژن ۰/۶۸ امکان دستیابی به شعله پایدار وجود دارد. این موضوع ناشی از اثرات شیمیایی آمونیاک در ناپایداری احتراق است.

موضوع مهم دیگر در ارتباط با احتراق آمونیاک که امکان گسترش و توسعه آن را در کاربردهای صنعتی فراهم می‌آورد، شناخت دقیق ساختار شعله و پارامترهای مربوط به شعله است. والرا-مدینا و همکاران [۱۳] در مطالعه‌ای به بررسی احتراق پیش‌آمیخته سوخت رقیق برای محفظه احتراق توربین گاز با استفاده از مشعل‌های چرخشی تغذیه شونده با سوخت آمونیاک-هیدروژن پرداختند. با توجه به نرخ‌های واکنشی پایین آمونیاک برای به کارگیری در محفظه احتراق توربین گاز، در این کار افزودن هیدروژن به این سوخت جهت برطرف کردن این معضل پیشنهاد شده است. مخلوط سوختی استفاده شده در این مطالعه شامل ۵۰ درصد کسر حجمی هیدروژن و ۵۰ درصد کسر حجمی آمونیاک است. علی‌رغم بهبود قابل توجه صورت گرفته در سرعت شعله آرام با افزودن هیدروژن به آمونیاک و رسیدن به مقادیر سرعت شعله آرام متان، محدوده کوچک عملکرد با توجه به امکان بازگشت شعله به داخل مشعل گزارش شده است. همچنین به علت مقادیر بالای تولید رادیکال‌های هیدروکسیل و اکسیژن، میزان ناکس به صورت چشمگیری افزایش می‌یابد. اوکافور و همکاران [۱۴] در مطالعه‌ای تجربی همراه با محاسبات سینتیک شیمیایی، سرعت سوزش آرام شعله پیش‌آمیخته متان-آمونیاک هوا را اندازه‌گیری کردند. نتایج بیانگر آن است که سرعت سوزش شعله آرام با افزایش آمونیاک موجود در سوخت، کاهش می‌یابد. احتراق آمونیاک-متان در مشعل‌های چرخشی مماسی در محفظه احتراق توربین گاز توسط والرا-مدینا و همکاران [۱۳، ۱۵] انجام شد. این مطالعه که به صورت تجربی و مدل‌سازی عددی انجام شده است نشان می‌دهد که احتراق کاملاً پیش‌آمیخته متان در محفظه احتراق با استفاده از سوخت آمونیاک کاملاً بهینه نمی‌باشد. همچنین در اعداد چرخش متوسط، سطح بالایی از ناپایداری شعله مشاهده شده است. همچنین تزریق مستقیم سوخت آمونیاک در زوایای چرخش پایین، بهترین روش ایجاد شعله در این مشعل‌ها معرفی شده است. ژیاو و همکاران [۱۶] مشخصه‌های احتراق پیش‌آمیخته آرام متان-آمونیاک را بررسی کردند. در این تحقیق که با استفاده از محاسبات سینتیک شیمیایی انجام شده است، تأثیر پارامترهایی همچون نسبت هم‌ارزی و مقدار کسر جرمی آمونیاک در ترکیب سوخت روی مشخصه‌های احتراقی و انتشار آلاینده‌ها مطالعه شده است. نتایج نشان دهنده آن است که انتشار مقادیر بالای ناکس با وجود کاهش چشمگیر CO و CO₂ تولید شده، چالش اصلی در شرایط استفاده از مقادیر بالای آمونیاک درون سوخت است. همچنین بررسی مشخصه‌های احتراق تحت شرایط افزودن آمونیاک به متان نشان می‌دهد که امکان کاهش چشمگیر آلاینده‌های جانبی با حفظ پایداری شعله وجود دارد. لی و همکاران [۱۷] در مطالعه‌ای به ارزیابی مدل‌های سینتیکی احتراق آمونیاک، بررسی ویژگی‌های آزادسازی گرما در شعله‌های NH₃، محاسبه ساختار شعله و نرخ واکنش‌های ابتدایی در شعله‌های آمونیاک با نسبت‌های مختلف افزودن کسر مولی H₂ و بررسی تأثیر افزودن هیدروژن بر مکانیزم زنجیره واکنش‌ها و ویژگی‌های آزادسازی گرما پرداختند. در این مطالعه از محاسبات سینتیک شیمیایی شعله آزاد لمینار پیش‌اختلاط در دما و فشار محیط برای سه نسبت هم‌ارزی ۰/۸، ۱ و ۱/۲ استفاده شده و مقادیر کسر مولی هیدروژن از ۰ تا ۰/۵ تغییر می‌کنند. براساس نتایج بدست آمده از این مطالعه می‌توان گفت که افزودن هیدروژن به آمونیاک منجر به افزایش مقدار حرارت آزاد شده از شعله می‌شود. در مقادیر کم افزودن هیدروژن افزایش حرارت آزاد شده ناشی از اثرات شیمیایی هیدروژن درون سوخت و در مقادیر بالای افزودن کسر مولی هیدروژن این موضوع ناشی از اثرات همزمان فیزیکی و شیمیایی افزودن هیدروژن به آمونیاک است. مطالعه مسیر واکنش‌های شیمیایی نشان می‌دهد که سه واکنش $H+NO+M=HNO+M$ ، $H+O_2=OH+O$ و $H_2O+O=OH+OH$ سه واکنش اصلی گرمازا در افزایش نرخ آزادسازی حرارت با افزودن هیدروژن به سوخت آمونیاک هستند.

اگرچه در سال‌های اخیر مطالعات متعددی به بررسی احتراق سوخت‌های ترکیبی آمونیاک-متان پرداخته‌اند، بخش عمده این پژوهش‌ها بر ارزیابی اثر نسبت اختلاط سوخت، شرایط عملیاتی، سینتیک‌های شیمیایی و ویژگی‌های آلاینده‌گی متمرکز

بوده‌اند. در مقابل، تأثیر پارامترهای هندسی سامانه تزریق، به‌ویژه قطر نازل سوخت، قطر نازل هوا و فاصله میان نازل‌ها، بر رفتار احتراقی این مخلوط سوختی، تاکنون به‌صورت نظام‌مند مورد بررسی قرار نگرفته است. این در حالی است که هندسه سامانه تزریق از طریق کنترل اختلاط اولیه سوخت و اکسیدکننده، شدت بازچرخش محصولات احتراق و نرخ رقیق‌سازی، نقش تعیین‌کننده‌ای در شکل‌گیری ساختار شعله، پایداری احتراق و توزیع دما ایفا می‌کند. بر همین اساس، پژوهش حاضر با هدف پر کردن این خلأ، اثر همزمان قطر نازل سوخت، قطر نازل هوا و فاصله میان نازل‌ها را بر عملکرد حرارتی و ویژگی‌های شعله در احتراق غیرپیش‌آمیخته مخلوط متان-آمونیاک در یک کوره بررسی می‌کند. برای این منظور، مدل‌سازی عددی مشعل غیرپیش‌آمیخته دانشگاه هواژونگ انجام شده و تأثیر پارامترهای هندسی بر توزیع دما، ساختار شعله و محدوده تشکیل شعله پایدار تحلیل شده است. در این مطالعه، توزیع دما به‌عنوان شاخص ارزیابی عملکرد حرارتی و توزیع رادیکال هیدروکسیل به‌عنوان معیار تعیین ساختار و ناحیه واکنش شعله مورد استفاده قرار گرفته است. نتایج این پژوهش می‌تواند در طراحی سامانه‌های تزریق و بهینه‌سازی مشعل‌های مبتنی بر سوخت‌های آمونیاک-متان برای دستیابی به احتراق پایدار و یکنواخت راهگشا باشد.

هندسه و شرایط مرزی حاکم بر کوره و مشعل احتراقی

در شکل ۱، شماتیک و ابعاد هندسی مربوط به کوره احتراقی ارائه شده است. سیستم احتراقی حاضر مربوط به دانشگاه هواژونگ کشور چین بوده که از آن برای مطالعه تجربی با استفاده از سوخت‌های مختلف تحت رژیم‌های احتراقی گوناگون استفاده شده است [۱۸-۲۰]. همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود، سوخت از مجرای میانی به قطر ۵ میلی‌متر وارد کوره شده و اکسیدکننده (هوا) از فضای حلقوی پیرامونی سوخت که دارای قطر داخلی و خارجی به ترتیب برابر با ۷ و ۱۷ میلی‌متر است، وارد کوره می‌شود. طول کوره ۶۰۰ میلی‌متر و قطر آن ۲۵۰ میلی‌متر است. انتهای کوره دودکش قرار دارد که شامل یک بخش شیب‌دار به طول ۵۰ میلی‌متر و یک بخش ثابت با طول و شعاع به ترتیب برابر با ۵۰ و ۲۵ میلی‌متر است.

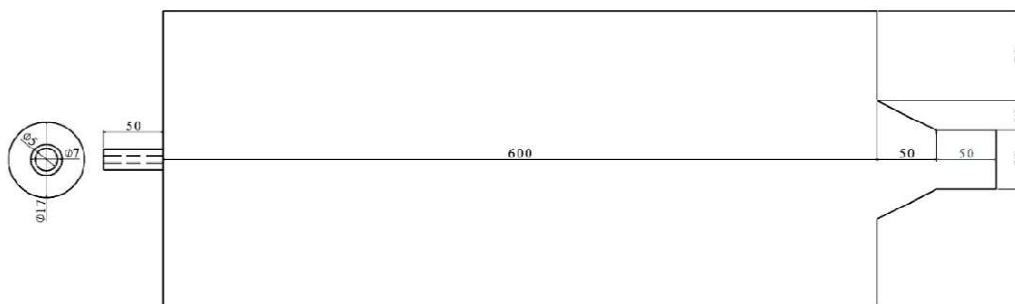


Figure 1- Geometry and dimensions of furnace and burner (dimensions in mm)

شکل ۱- هندسه و ابعاد کوره و مشعل احتراقی (ابعاد برحسب میلی‌متر)

از آنجا که از کوره حاضر برای اندازه‌گیری‌های تجربی با استفاده از هر دو سوخت متان خالص و متان-آمونیاک استفاده شده است، در جدول ۱ به بیان شرایط مرزی برای هر یک از حالات احتراقی تحت تست‌های تجربی (داده‌های مورد استفاده برای اعتبارسنجی) پرداخته شده است.

جدول ۱- شرایط مرزی حاکم بر کوره تحت شرایط مخلوط‌های متان-هوا و مخلوط متان-آمونیاک-هوا

Table 1- Boundary conditions governed on furnace under the methane-air and methane-ammonia-air mixtures

Combustion condition	Boundary condition position	Boundary condition type			
		Thermal	Hydrodynamic	Pressure (bar)	Species mole fraction (%)
CH ₄ -air	Fuel inlet	T=298 K	u=14.2 m/s	Zero gradient	X _{CH₄} = 100%
	Oxidant inlet	T=298 K	u=16.37 m/s	Zero gradient	X _{O₂} = 21% X _{N₂} = 79%
	Furnace wall	Insulation	No-slip	Zero gradient	Zero gradient
	Chimney wall	Insulation	No-slip	Zero gradient	Zero gradient
	Furnace outlet	Insulation	No-slip	Pressure outlet	Zero gradient
CH ₄ -NH ₃ -air	Fuel inlet	T=298 K	Q= 18 lit/min	Zero gradient	X _{CH₄} =75, 85, 89, 95, 97, 99, 100 X _{NH₃} =25, 15, 11, 5, 3, 1, 0
	Oxidant inlet	T=298 K	Q= 190.1 lit/min	Zero gradient	X _{O₂} = 21% X _{N₂} = 79%
	Furnace wall	Insulation	No-slip	Zero gradient	Zero gradient
	Chimney wall	Insulation	No-slip	Zero gradient	Zero gradient
	Furnace outlet	Insulation	No-slip	Pressure outlet	Zero gradient

تنظیمات حل عددی

با توجه به تقارن فیزیکی و هندسی (هندسه استوانه‌ای شکل کوره و مشعل) شبیه‌سازی به صورت متقارن محوری انجام شده است. در مدل‌سازی عددی، معادلات ناویر-استوکس متوسط گیری شده به روش رینولدز به وسیله نرم افزار انسیس فلوئنت حل شده‌اند. به منظور مدل‌سازی آشفستگی از مدل‌های کی-اِپسیلون استاندارد^۱، کی-اِپسیلون استاندارد اصلاح شده^۲، کی-اِپسیلون ریلیزبل^۳، کی-اِمگا اس اس تی^۴ و مدل تنش رینولدز^۵ استفاده شده که براساس نتایج بدست آمده، مدل تنش رینولدز برای تقریب عبارت‌های تنش رینولدز در معادلات جریان آشفته استفاده شده است. همچنین به منظور مدل‌سازی برهمکنش میان شیمی و آشفستگی جریان از مدل احتراقی مفهوم اتلاف گردابه^۶ به عنوان مدلی با دقت مناسب در شبیه‌سازی شعله آشفته غیرپیش آمیخته استفاده شده است. مدل‌سازی عبارت انتقال حرارت تشعشعی با توجه به اهمیت این انتقال حرارت در فرآیندهای احتراقی به علت دمای بالای شعله به وسیله مدل فاز گسسته^۷ انجام شده که در آن محاسبه ضرایب جذب و گسیل با استفاده از مدل جمع وزنی گازهای خاکستری^۸ که دقت بالایی در محاسبات فرآیندهای واکنشی در اختیار قرار می‌دهد، انجام شده است. در نهایت، با توجه به هدف بررسی ساختار شعله و شناسایی محدوده عملکرد پایدار در مطالعه حاضر، لازم است تا از سینتیک شیمیایی در محاسبه نرخ واکنش‌ها استفاده شود که شامل گونه‌های میانی و رادیکال‌ها بوده و قابلیت پیش‌بینی مقادیر گونه‌ها را با دقت بالایی داشته باشد. با توجه به این موضوع در قسمت اعتبارسنجی، نتایج مربوط به سه سینتیک GRI3.0، مندیارا^۹ و کاست^{۱۰} که به صورت گسترده در مطالعات پیشین برای احتراق متان-آمونیاک مورد استفاده قرار گرفته است، ارائه شده و براساس عملکرد، سینتیک شیمیایی با بالاترین دقت جهت ادامه مدل‌سازی‌ها مورد استفاده قرار گرفته است.

در مدل‌سازی‌ها از الگوریتم کاپلد^{۱۱} به منظور حل معادلات تکانه و معادله فشار بدست آمده از معادله پیوستگی استفاده شده

¹ Standard k-ε

² Modified standard k-ε

³ k-ε realizable

⁴ k-ω SST

⁵ Reynolds stress model (RSM)

⁶ Eddy dissipation concept (EDC)

⁷ Discrete ordinate

⁸ Weighted-sum-of-gray-gases model (WSGGM)

⁹ Mendiara

¹⁰ KAUST

¹¹ Coupled

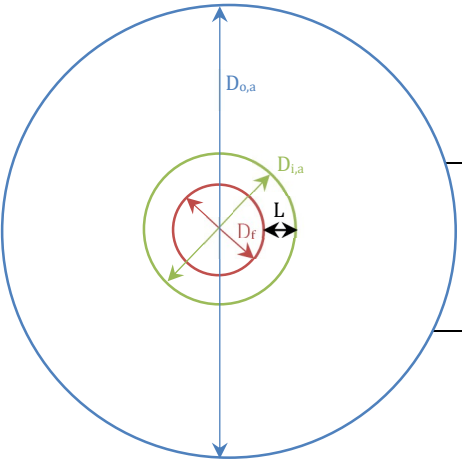
تا سرعت همگرایی حل عددی افزایش یابد. گسسته‌سازی ترم‌های نوفذ از طریق اختلاف مرکزی و برای ترم‌های جابجایی با استفاده از روش بالادست مرتبه دوم انجام شده است. معیار همگرایی حل نیز به دو صورت لحاظ شده است؛ معیار اول رسیدن باقی مانده معادله انرژی به کمتر از 10^{-6} و رسیدن باقی مانده سایر معادلات به کمتر از 10^{-5} بوده و معیار ثانویه کاهش تغییرات دمایی و رادیکال هیدروکسیل در خروجی کوره به کمتر از یک دهم درصد بین مدل‌سازی در صد تکرار متوالی است.

شرایط حاکم بر مدل‌سازی عددی

در جدول ۲، شرایط حاکم بر مدل‌سازی‌های عددی ارائه شده است. هندسه اصلی مورد استفاده در پژوهش تجربی به عنوان هندسه مبنا در نظر گرفته شده و تغییر در قطر نازل سوخت و هوای ورودی و همچنین فاصله میان دو نازل در هر قسمت به گونه‌ای انجام شده است که سایر ابعاد هندسی مطابق با جدول ۲، برابر با مقادیر هندسه اصلی می‌باشند. همچنین باید توجه کرد که در تغییر ابعاد هندسه ورودی شرایط به گونه‌ای در نظر گرفته شده که ابعاد نسبت به هندسه اصلی هم کاهش و هم افزایش داشته باشند تا تأثیر هر دو رویکرد در مطالعه حاضر مشاهده شده باشد. همچنین باید توجه داشت که در هر هندسه تغییرات ترکیب سوخت و متان از شرایط احتراق با متان خالص تا ترکیب آمونیاک با متان تا حداکثر کسر جرمی ۹۰ درصدی مورد توجه قرار گرفته است.

جدول ۲- شرایط هندسه ورودی و کسر جرمی آمونیاک برای مدل‌سازی‌های عددی

Table 2- Inlet geometry condition and ammonia mass fraction for numerical modelling

No.	Inlet geometry	$D_{h,a}$ (mm)	L (mm)	D_f (mm)	Y_{NH_3}
1		10 12 14	1	4	0-0.9
2		10	0.5 1 2 4	4	0-0.9
3		10	1	3 3 6	0-0.9

$$D_{h,a} = D_{o,a} - D_{i,a}$$

اعتبارسنجی نتایج کوره احتراقی

به‌منظور ارزیابی حساسیت نتایج نسبت به اندازه شبکه، چهار شبکه محاسباتی شامل ۱۶۸۰۰، ۳۰۰۰۰، ۶۱۷۰۰ و ۱۱۵۲۰۰ سلول مورد بررسی قرار گرفت. معیارهای ارزیابی شامل توزیع دما و کسر مولی رادیکال هیدروکسیل در امتداد محور مرکزی محفظه احتراق بودند. همان‌گونه که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، اختلاف نتایج بین شبکه‌های ۱۶۸۰۰ و ۳۰۰۰۰ سلولی با شبکه‌های ریزتر قابل توجه است، در حالی که با افزایش تعداد سلول‌ها به ۶۱۷۰۰، تغییرات هر دو پارامتر به میزان چشمگیری کاهش یافته و انطباق بسیار مناسبی با نتایج شبکه ۱۱۵۲۰۰ سلولی حاصل شد. به‌منظور کمی‌سازی خطای ناشی از گسسته‌سازی،

شاخص همگرایی شبکه نیز بر اساس روش Roache محاسبه شد. مقادیر شاخص همگرایی برای دما و کسر مولی رادیکال هیدروکسیل به ترتیب ۰/۲٪ و ۰/۸٪ به دست آمد که به مراتب کمتر از آستانه متداول ۱٪ بوده و بیانگر استقلال مؤثر نتایج از اندازه شبکه است. با توجه به اختلاف ناچیز بین دو شبکه نهایی و همچنین افزایش قابل توجه هزینه محاسباتی در شبکه ۱۱۵۲۰۰ سلولی، شبکه ۶۱۷۰۰ سلولی به عنوان شبکه بهینه برای انجام تمامی شبیه‌سازی‌های این پژوهش انتخاب شد.

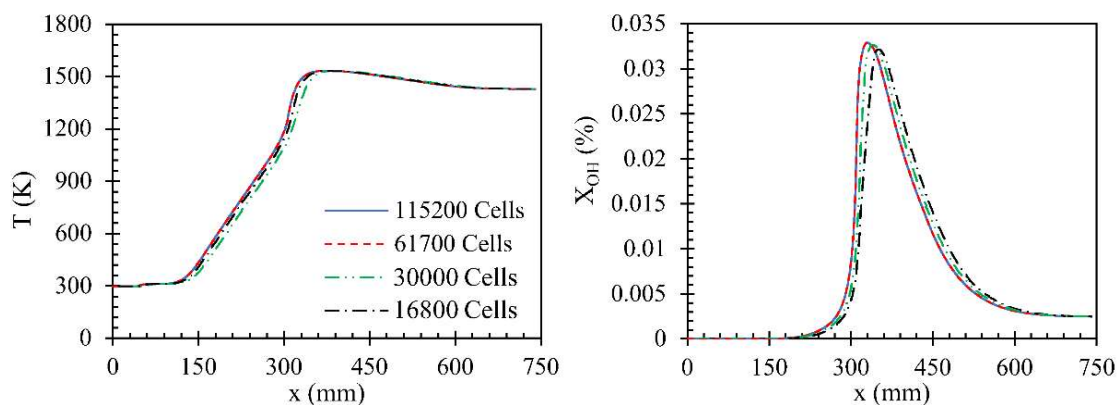


Figure 2- Grid independence results for temperature and OH mole fraction on the centerline of furnace

شکل ۲- نتایج استقلال از شبکه برای دما و کسر مولی گونه OH روی خط مرکزی کوره

اعتبارسنجی مدل‌های مختلف و سینتیک‌های شیمیایی مورد استفاده در شبیه‌سازی احتراق از اهمیت بالایی برخوردار است. با توجه به این موضوع برای انجام مطالعه حاضر بررسی مدل‌های آشفته‌گی مختلف، توابع دیواره گوناگون، مدل‌های مختلف احتراقی و سه سینتیک شیمیایی پر کاربرد در احتراق متان و متان-آمونیاک صورت پذیرفت. در این قسمت با توجه به حجم بالای نتایج اعتبارسنجی بدست آمده صرفاً به مقایسه داده‌های حاصل از سینتیک‌های شیمیایی مختلف پرداخته می‌شود (مطالعه روی مدل‌های آشفته‌گی، توابع دیواره و مدل احتراقی نشان می‌دهد که استفاده از مدل تنش رینولدز، تابع دیواره توسعه داده شده توسط ولفشتین [۲۱، ۲۲] و مدل احتراقی مفهوم اتلاف گردابه منجر به نتایجی با دقت بالا می‌شود).

پژوهش‌های گذشته نشان می‌دهند که سینتیک شیمیایی کلیدی‌ترین و مؤثرترین پارامتر در دقت شبیه‌سازی احتراق سوخت آمونیاک است که علت اصلی آن تحقیقات نسبتاً کم پیرامون آن تا سال ۲۰۱۵ است. در طی دهه اخیر مطالعات بسیار گسترده تجربی و عددی در ارتباط با سینتیک‌های شیمیایی احتراق آمونیاک انجام شده است که برای افزایش دقت مدل‌سازی‌های عددی و محاسبات شیمیایی بوده است. با توجه به اهمیت موضوع در مطالعه حاضر اعتبارسنجی سینتیک شیمیایی در دو قسمت انجام شده است. در قسمت اول اعتبارسنجی با نتایج کوره که شامل سوخت متان خالص بوده و داده‌های تجربی گسترده‌ای را شامل می‌شوند، انجام گرفته است؛ پس از آن شبیه‌سازی احتراق سوخت آمونیاک-متان که سوخت اصلی در پژوهش حاضر بوده و هدف اصلی تحقیق است با استفاده از داده‌های انتشار ناکس از خروجی کوره انجام شده است. در مطالعه حاضر داده‌های سینتیک GRI3.0 با داده‌های دو سینتیک شیمیایی مندیارا و همکاران و همچنین سینتیک شیمیایی KAUST که به صورت سینتیک شیمیایی کاهش یافته آرامکو برای احتراق مخلوط آمونیاک-متان ارائه شده است، با داده‌های تجربی مقایسه شده‌اند. علت انتخاب این دو سینتیک‌ها، دقت بالا در محاسبات مربوط به احتراق آمونیاک-متان با تعداد گونه قابل شبیه‌سازی در مدل‌سازی عددی است. مشخصات مربوط به سینتیک‌های انتخاب شده در جدول ۳ ارائه شده‌اند.

جدول ۳- شرایط سینتیک‌های شیمیایی انتخاب شده برای اعتبارسنجی

Table 3- Condition of selected chemical mechanisms for validation

Chemical kinetic name	Species No.	Chemical reaction No.	Reference
GRI3.0	53	325	[۲۳]
Mendiara	97	779	[۲۴]
KAUST	64	593	[۲۶، ۲۵]

شکل ۳ مقایسه میان توزیع دما و کسر مولی خشک گونه‌های دی‌اکسیدکربن و اکسیژن را برای سه سینتیک شیمیایی جدول ۳ با داده‌های تجربی نشان می‌دهد. به طور کلی می‌توان مشاهده کرد که دقت سینتیک‌های شیمیایی KAUST و مندیارا بالاتر از سینتیک شیمیایی GRI3.0 بوده و در میان سینتیک‌های شیمیایی در نظر گرفته شده سینتیک KAUST بالاترین دقت را در پیش‌بینی مقادیر توزیع دما و کسر مولی گونه‌های خشک اکسیژن و دی‌اکسید کربن فراهم می‌کند. سینتیک شیمیایی KAUST در مقایسه با دو سینتیک دیگر، پیش‌بینی صحیح‌تر و دقیق‌تری از از محل تشکیل شعله ارائه کرده که این موضوع منجر به افزایش دقت مقادیر محاسبه شده در فواصل شعاعی کمتر به ویژه در مقادیر فواصل مرکزی کوچکتر شده است. علت افزایش دقت نتایج با این سینتیک بیشتر مربوط به ضرایب آرنیوسی دقیق‌تر و در نتیجه دقت بالاتر در محاسبه نرخ واکنش‌های شیمیایی است. با توجه به موضوع تحقیق، پیش‌بینی دقیق‌تر محل آغاز واکنش‌های شیمیایی و ناحیه واکنشی اهمیت بالایی داشته و منجر به افزایش دقت تحلیل‌ها و نتایج حاصل شده خواهد شد.

شکل ۴ تغییرات کسر مولی گونه‌های خشک CO و NO را برای سینتیک‌های شیمیایی ارائه شده در جدول ۳ با داده‌های تجربی در فواصل محوری ۱۱۵، ۱۸۵، ۲۵۰، ۳۵۰، ۴۵۰ و ۵۵۰ میلی‌متر نشان می‌دهد. در این قسمت نیز مشاهده می‌شود که سینتیک شیمیایی KAUST به علت محاسبه دقیق‌تر نرخ واکنش‌های شیمیایی منجر به کاهش خطا در محاسبه گونه‌های ناکس و مونوکسیدکربن شده و دقت مدل‌سازی عددی را به صورت قابل توجهی افزایش می‌دهد؛ این افزایش به گونه‌ای است که در پیش‌بینی ناکس دقت مدل‌سازی‌ها در تمامی فواصل محوری بسیار بالا بوده به گونه‌ای که خطاب متوسط کمتر از ۲ درصد و خطای بیشینه حدود ۱۵ درصدی (صرفاً در فاصله محوری ۱۱۵ میلی‌متر) فراهم می‌آورد.

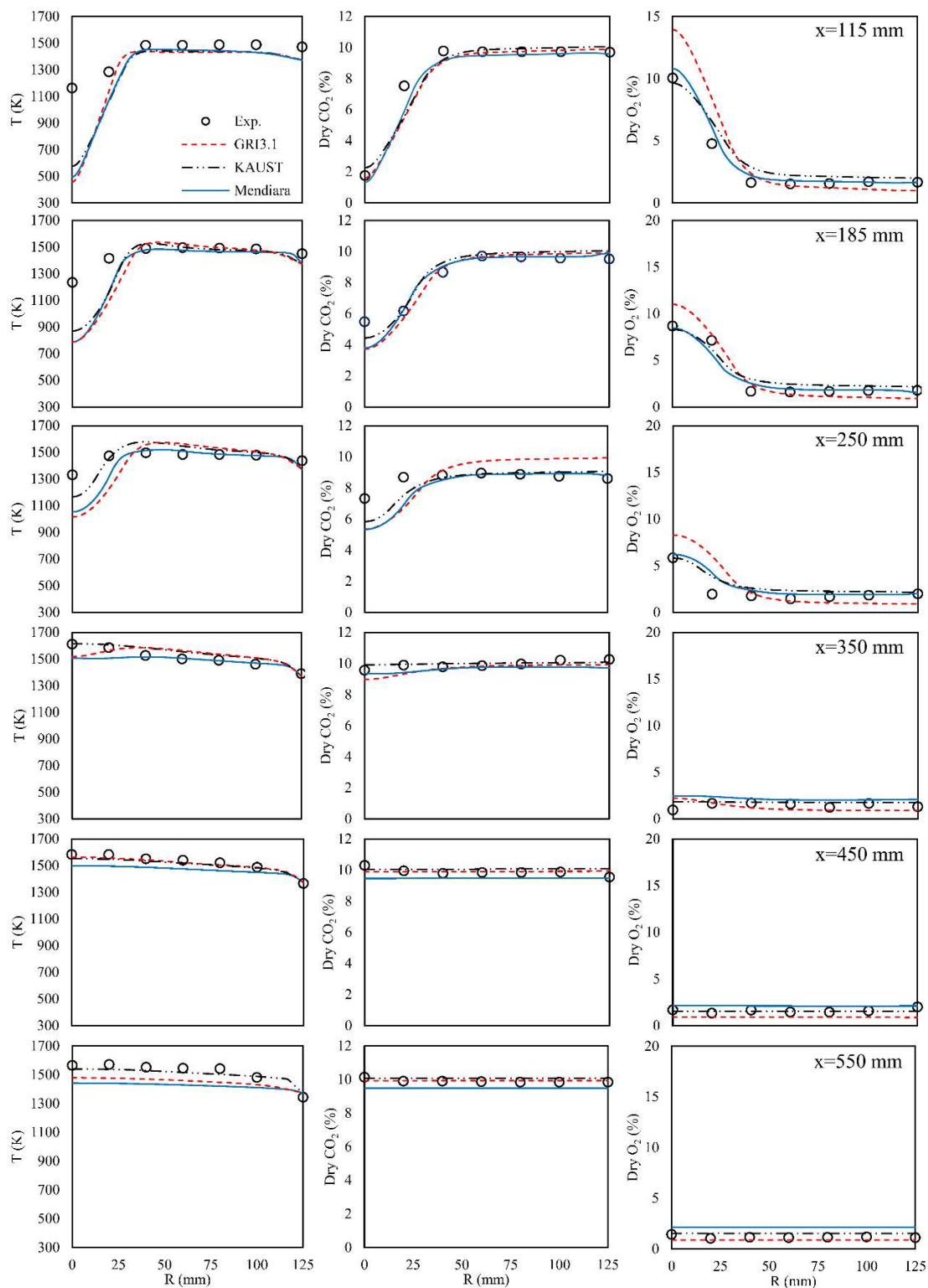


Figure 3- Validation of radial distribution of temperature, O_2 and CO_2 dry mole fractions for different chemical kinetics

شکل ۳- اعتبارسنجی توزیع شعاعی دما، کسر مولی خشک گونه‌های دی‌اکسید کربن و اکسیژن برای سینتیک‌های شیمیایی مختلف

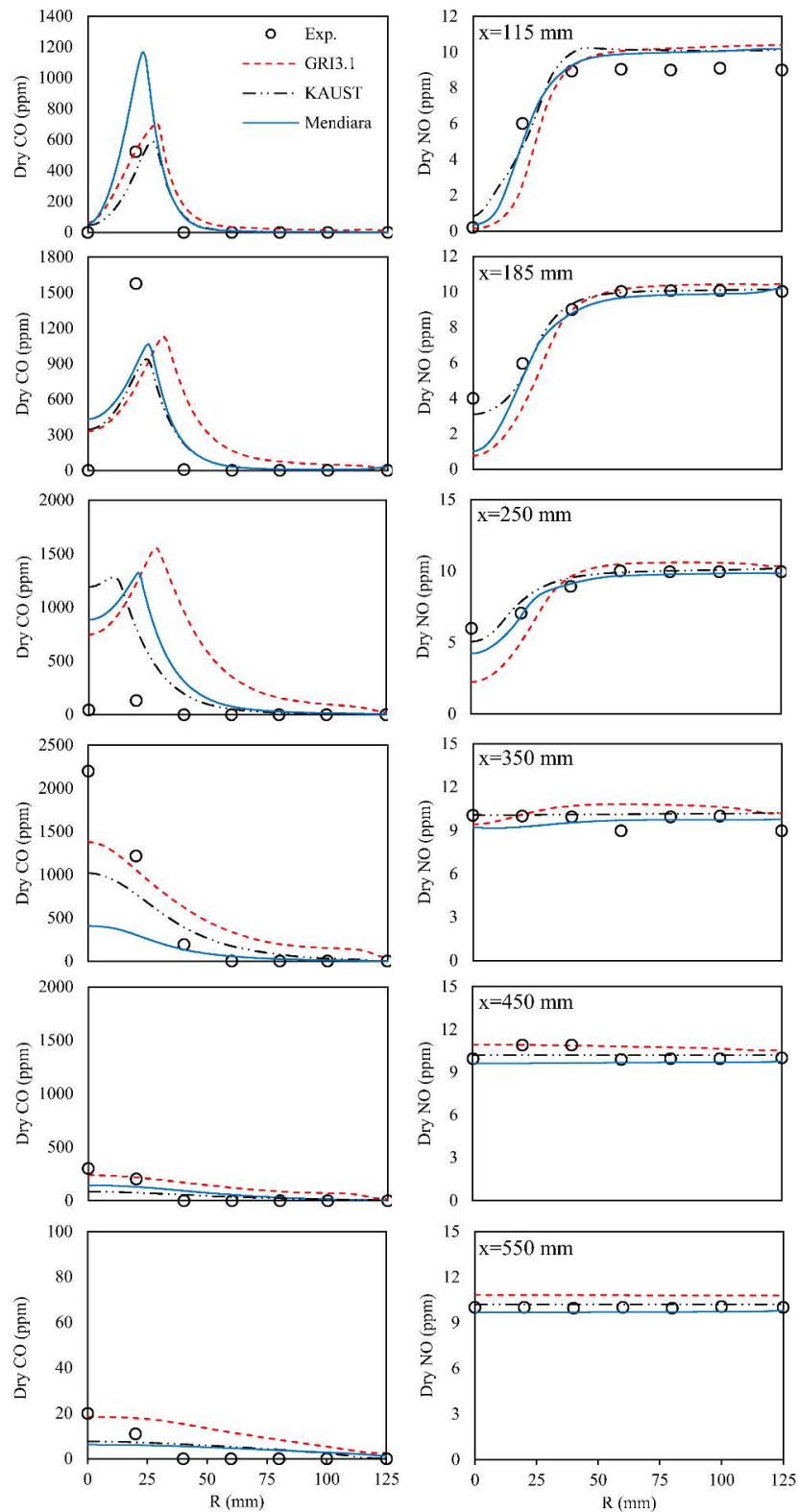


Figure 4- Validation of CO and NO dry volume fractions by GRI3.0, Mendiara and KAUST mechanisms

شکل ۴- اعتبارسنجی کسر مولی خشک گونه‌های مونوکسید کربن و ناکس به وسیله سینتیک‌های GRI3.0، مندیارا و KAUST

شکل ۵ تغییرات مقادیر انتشار ناکس برای احتراق آمونیاک-متان را برای مقادیر ۰ تا ۲۵ درصدی کسر حجمی آمونیاک درون سوخت با استفاده از داده‌های مدل‌سازی به کمک دو سینتیک شیمیایی مندیارا و KAUST را با داده‌های تجربی نشان می‌دهد. براساس نتایج بدست آمده می‌توان مشاهده کرد که با افزایش آمونیاک موجود در سوخت، اهمیت سینتیک شیمیایی مورد استفاده در پیش‌بینی دقیق‌تر داده‌ها به صورت قابل توجهی افزایش می‌یابد. داده‌های بدست آمده بیانگر دقت بالای سینتیک شیمیایی KAUST در پیش‌بینی انتشار ناکس در شرایط حضور آمونیاک در ساختار سوخت است (مقادیر خطا برای سینتیک KAUST در تمامی حالات شبیه‌سازی‌ها کمتر از ۵ درصد است).

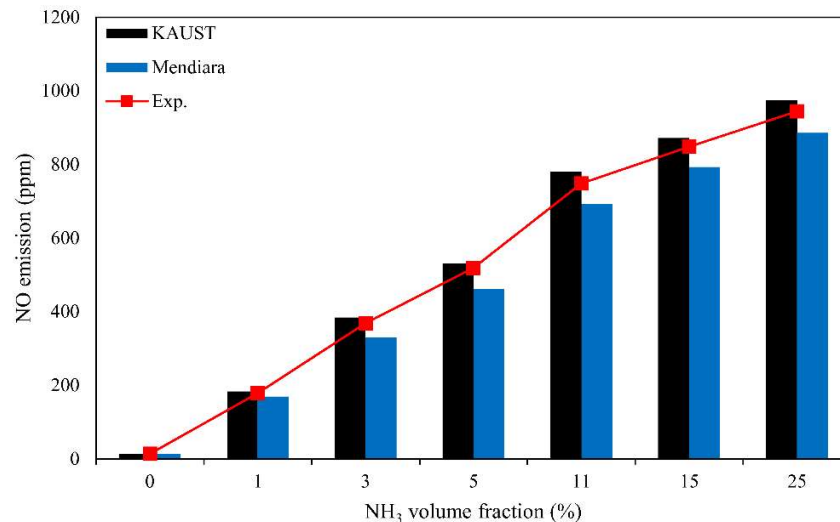


Figure 5- Comparison of NO_x emission values for experimental methane-ammonia combustion by different values of ammonia in fuel with modelling data

شکل ۵- مقایسه مقادیر انتشار ناکس تجربی احتراق آمونیاک-متان با مقادیر مختلف آمونیاک در سوخت با داده‌های مدل‌سازی

نتایج

در این قسمت نتایج مربوط به تأثیر هندسه ورودی مشعل غیرپیش‌آمیخته بر عملکرد حرارتی، ساختار شعله و محدوده پایدار تشکیل شعله پایدار متان-آمونیاک ارائه شده است. ابتدا نتایج مربوط به عملکرد حرارتی و پس از آن نتایج مربوط به ساختار شعله و محدوده پایداری ارائه خواهند شد. لازم به ذکر است که در بررسی اثر قطر نازل‌های سوخت و هوا، سرعت ورودی در تمامی حالات ثابت نگه داشته شد. از آنجا که تغییر قطر نازل موجب تغییر سطح مقطع عبور جریان می‌شود، دبی جرمی نیز به صورت طبیعی تغییر می‌کند. بنابراین، تغییرات مشاهده‌شده در مشخصات احتراق ناشی از اثر توأم تغییر هندسه نازل و تغییر دبی جرمی ورودی بوده و نتایج این بخش باید در چارچوب این شرایط عملیاتی تفسیر شوند. این رویکرد با هدف شبیه‌سازی شرایط واقعی طراحی مشعل انتخاب شد، زیرا در بسیاری از کاربردهای صنعتی، تغییر قطر نازل در صورت ثابت بودن سرعت تزریق، به طور اجتناب‌ناپذیر با تغییر دبی جرمی همراه است. در مقابل، در بررسی اثر فاصله بین نازل‌های سوخت و هوا، قطر نازل‌ها و شرایط ورودی ثابت نگه داشته شدند؛ از این رو، تغییرات مشاهده‌شده در این بخش را می‌توان مستقیماً به تغییر فاصله بین نازل‌ها نسبت داد.

تأثیر هندسه ورودی بر عملکرد حرارتی

مطابق شکل ۶، در یک کسر جرمی مشخص آمونیاک، کاهش قطر نازل سوخت موجب افزایش بیشینه دمای شعله می‌شود. افزایش قطر نازل، با ثابت بودن شرایط ورودی، باعث کاهش تکانه محوری جت سوخت و در نتیجه افزایش زمان اختلاط آن با محصولات احتراقی بازچرخش یافته پیش از آغاز واکنش‌های شیمیایی می‌شود. در این شرایط، محل تشکیل ناحیه اصلی واکنش به سمت پایین دست جابه‌جا شده و سهم محصولات داغ در ترکیب واکنش‌دهنده‌ها افزایش می‌یابد. این فرآیند موجب رقیق شدن مخلوط، کاهش غلظت موضعی سوخت و اکسیژن و افزایش ظرفیت حرارتی مؤثر محیط واکنش شده و در نهایت نرخ آزادسازی حرارت در ناحیه واکنش را کاهش می‌دهد. در نتیجه، بیشینه دمای شعله کاهش یافته و انرژی حرارتی در حجم بزرگ‌تری از محفظه احتراق توزیع می‌شود. علاوه بر این، نتایج نشان می‌دهد که افزایش قطر نازل سوخت و افزایش کسر جرمی آمونیاک هر دو به یکنواخت‌تر شدن میدان دما منجر می‌شوند. افزایش اختلاط پیش از اشتعال، گرادیان‌های شدید دمایی را تضعیف کرده و از تشکیل نواحی موضعی با نرخ آزادسازی حرارت بالا جلوگیری می‌کند. از سوی دیگر، جایگزینی متان با آمونیاک به دلیل واکنش‌پذیری کمتر، سرعت شعله پایین‌تر و تولید آهسته‌تر گونه‌های فعال، شدت واکنش‌های گرمازا را کاهش می‌دهد. برهم‌کنش این دو مکانیزم سبب کاهش تمرکز آزادسازی حرارت، حذف نقاط داغ و در نهایت ایجاد توزیع دمایی یکنواخت‌تر در محفظه احتراق می‌شود.

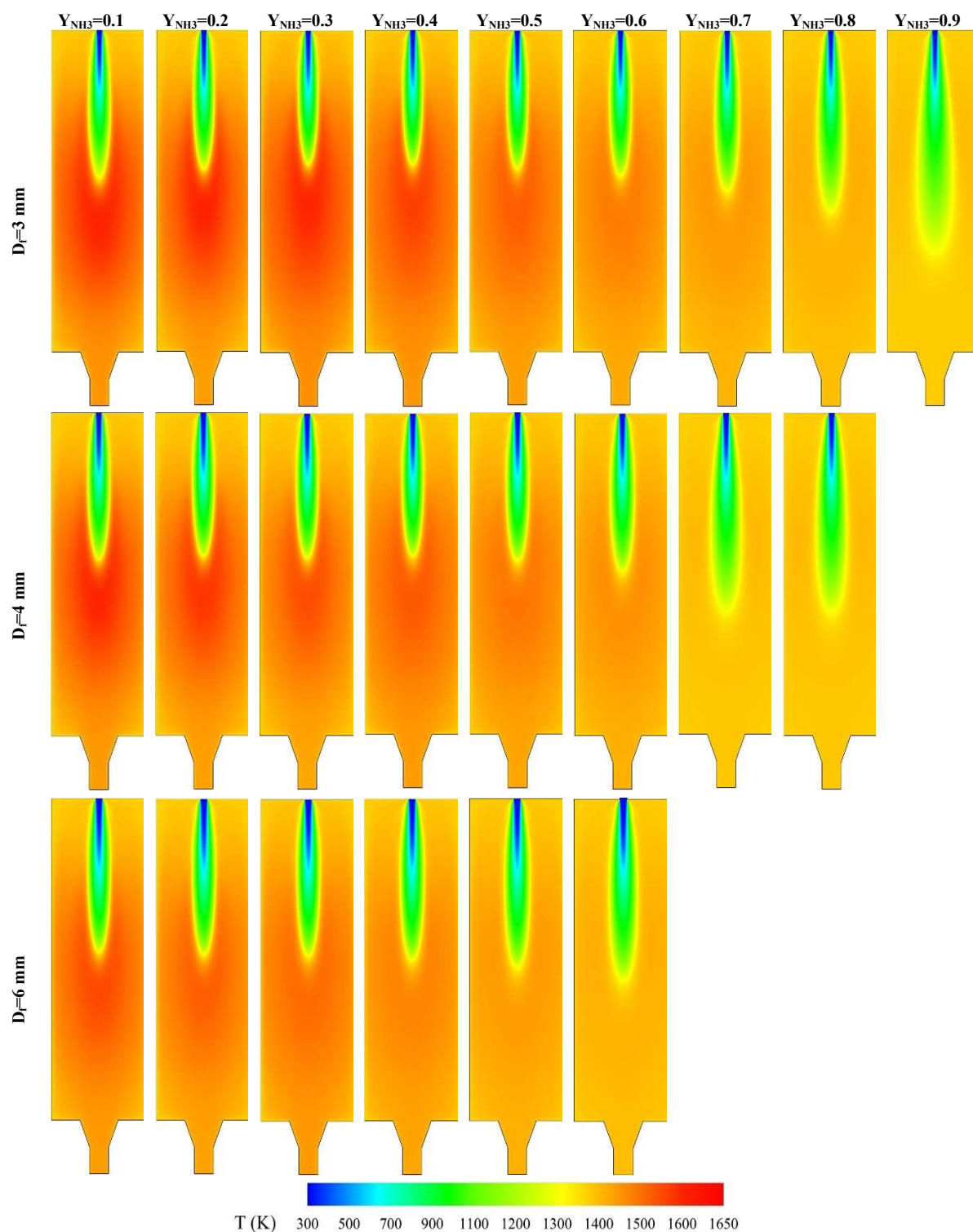


Figure 6- Effect of fuel nozzle diameter on the thermal performance of methane-ammonia non-premixed combustion

شکل ۶- تأثیر قطر نازل سوخت بر عملکرد حرارتی احتراق غیرپیش آمیخته متان-آمونیاک

شکل ۷ تأثیر قطر نازل هوای ورودی را در ترکیب‌های مختلف سوخت آمونیاک- متان بر توزیع دما در محفظه احتراق نشان می‌دهد. به طور کلی، صرف‌نظر از قطر نازل هوا، افزایش کسر جرمی آمونیاک در مخلوط سوخت با کاهش دمای بیشینه شعله

همراه است. این رفتار را می‌توان به ویژگی‌های ذاتی احتراق آمونیاک نسبت داد. آمونیاک در مقایسه با متان دارای واکنش‌پذیری کمتر، سرعت شعله پایین‌تر و ارزش حرارتی کمتری است؛ از این رو با افزایش سهم آن در سوخت، نرخ تولید رادیکال‌های فعال و در نتیجه شدت واکنش‌های گرمازا کاهش می‌یابد. کاهش نرخ آزادسازی انرژی سبب می‌شود انرژی تولیدشده در مدت زمان طولانی‌تر و در حجم بزرگ‌تری از محفظه آزاد شود و بنابراین بیشینه دمای شعله کاهش یابد. همچنین نتایج نشان می‌دهد که تا حدود ۵۰ درصد کسر جرمی آمونیاک، کاهش دمای بیشینه روندی تقریباً ملایم دارد، اما با افزایش بیشتر سهم آمونیاک، افت دما با شیب بیشتری رخ می‌دهد. این رفتار بیانگر آن است که در غلظت‌های بالای آمونیاک، محدودیت‌های سینتیکی احتراق بر فرآیند انتقال حرارت غلبه کرده و کنترل اصلی میدان دما را بر عهده می‌گیرند. اثر قطر نازل هوای ورودی نیز روند مشخصی را در تغییر ساختار حرارتی محفظه نشان می‌دهد. با ثابت بودن سرعت ورودی، افزایش قطر نازل باعث افزایش سطح مقطع جریان و در نتیجه افزایش دبی جرمی هوا می‌شود. ورود جرم بیشتری از هوا، نسبت هوا به سوخت را افزایش داده و سبب می‌شود بخش قابل توجهی از انرژی حاصل از احتراق صرف افزایش آنتالپی مخلوط گازی شود. در نتیجه، اگرچه مقدار کل انرژی آزادشده تغییر محسوسی نمی‌کند، اما این انرژی در جرم بیشتری از سیال توزیع شده و از تشکیل نواحی با دمای بسیار بالا جلوگیری می‌شود. از سوی دیگر، افزایش دبی جرمی هوا موجب تقویت جریان‌های بازچرخشی درون محفظه احتراق می‌شود. این بازچرخش، محصولات داغ احتراق را در حجم بزرگ‌تری از محفظه منتشر کرده و پیش از رسیدن واکنش‌دهنده‌ها به ناحیه اصلی احتراق، فرآیند پیش‌گرمایش و اختلاط را تشدید می‌کند. در نتیجه، واکنش‌های شیمیایی در ناحیه وسیع‌تری توزیع شده و تمرکز آزادسازی حرارت کاهش می‌یابد که پیامد مستقیم آن کاهش بیشینه دمای شعله است.

علاوه بر این، افزایش قطر نازل هوا باعث گسترش ناحیه اولیه اختلاط در ورودی محفظه می‌شود. در این شرایط، واکنش‌دهنده‌ها پیش از آغاز واکنش‌ها، مدت زمان بیشتری را در تماس با محصولات احتراقی بازچرخش‌یافته سپری می‌کنند. این موضوع علاوه بر افزایش دمای اولیه مخلوط، موجب کاهش گرادیان‌های غلظتی اکسیژن و سوخت در ناحیه واکنش می‌شود. بنابراین آزادسازی انرژی به جای آنکه در یک ناحیه محدود متمرکز شود، در حجم بزرگ‌تری از محفظه توزیع شده و ساختار حرارتی یکنواخت‌تری ایجاد می‌کند. به همین دلیل، با افزایش قطر نازل هوا، طول ناحیه با دمای متوسط افزایش یافته و شدت نقاط داغ در مرکز شعله به طور محسوسی کاهش می‌یابد. در مقابل، کاهش قطر نازل هوا با ثابت بودن سرعت ورودی، دبی جرمی هوا را کاهش می‌دهد و در نتیجه شدت بازچرخش داخلی محصولات احتراق نیز تضعیف می‌شود. کاهش میزان محصولات بازچرخش‌یافته سبب می‌شود سهم گازهای داغ در پیش‌گرمایش واکنش‌دهنده‌ها کاهش یافته و فرآیند اختلاط در فاصله کوتاه‌تری انجام گیرد. در این شرایط، آزادسازی حرارت در حجم کوچک‌تری متمرکز شده و چگالی توان حرارتی ناحیه واکنش افزایش می‌یابد. پیامد این فرآیند، افزایش دمای بیشینه شعله و تشکیل نواحی موضعی با گرادیان دمایی بالا است. علاوه بر این، کاهش دبی هوا ظرفیت حرارتی کل مخلوط را نیز کاهش می‌دهد؛ بنابراین انرژی آزادشده در جرم کمتری از سیال توزیع شده و افزایش دمای موضعی شعله تشدید می‌شود. بررسی هم‌زمان اثر قطر نازل هوا و ترکیب سوخت نشان می‌دهد که این دو پارامتر اگرچه از مکانیزم‌های متفاوتی بر میدان دما اثر می‌گذارند، اما در نهایت روند مشابهی را ایجاد می‌کنند. افزایش قطر نازل هوا عمدتاً از طریق افزایش جرم سیال، تقویت بازچرخش محصولات احتراق و کاهش چگالی آزادسازی حرارت، بیشینه دمای شعله را کاهش می‌دهد؛ در حالی که افزایش سهم آمونیاک این کاهش را از طریق محدود کردن سینتیک واکنش‌های احتراقی و کاهش شدت تولید حرارت ایجاد می‌کند. برهم‌کنش این دو مکانیزم سبب حذف تدریجی نواحی با دمای بسیار بالا، کاهش گرادیان‌های حرارتی و تشکیل میدان دمایی یکنواخت‌تر در محفظه احتراق می‌شود.

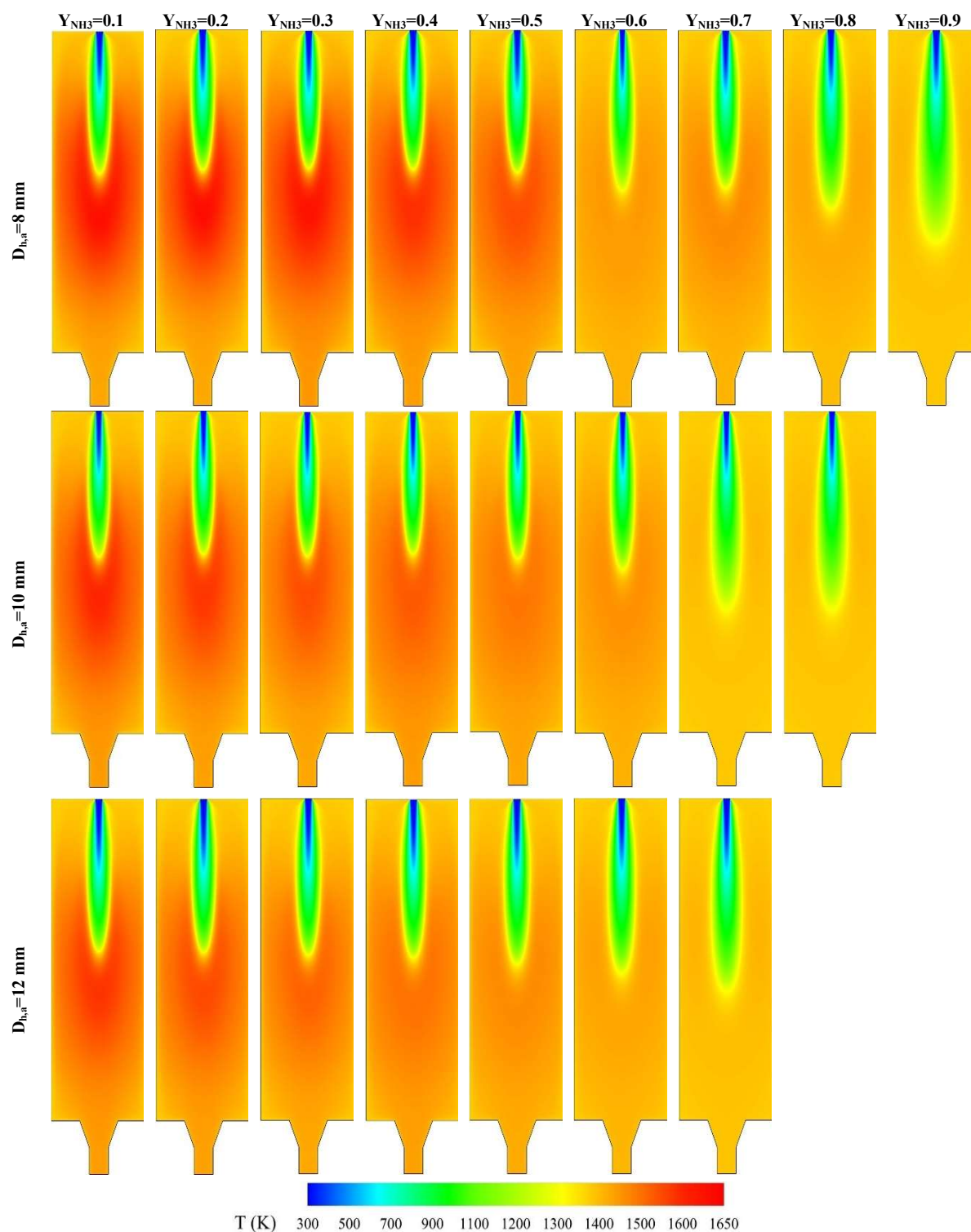


Figure 7- Effect of air inlet diameter and different ammonia mass fraction in the fuel mixture on temperature distribution into the furnace with non-premixed burner

شکل ۷- تأثیر قطر ورودی هوا و مقادیر مختلف کسر جرمی آمونیاک در مخلوط سوخت بر توزیع دما درون کوره با مشعل غیرپیش آمیخته

شکل ۸- تأثیر فاصله بین نازل‌های سوخت و هوا را بر توزیع دما در محفظه احتراق مشعل غیرپیش آمیخته برای کسرهای جرمی مختلف آمونیاک در سوخت نشان می‌دهد. همان گونه که در بخش‌های قبل نیز مشاهده شد، افزایش کسر جرمی آمونیاک

در تمامی فواصل بین نازل‌ها با کاهش دمای بیشینه شعله همراه است. این رفتار ناشی از ویژگی‌های ذاتی احتراق آمونیاک از جمله واکنش‌پذیری پایین‌تر، سرعت شعله کمتر، انرژی فعال‌سازی بالاتر و ارزش حرارتی کمتر نسبت به متان است. در نتیجه، با افزایش سهم آمونیاک، نرخ تشکیل گونه‌های فعال نظیر H ، O و OH کاهش یافته و سرعت پیشرفت واکنش‌های گرمازا محدود می‌شود. بنابراین، حتی در شرایطی که ساختار جریان تغییر نکند، شدت آزادسازی حرارت کاهش یافته و بیشینه دمای شعله در تمامی فواصل بین نازل‌ها روندی کاهشی خواهد داشت. علاوه بر این، نتایج نشان می‌دهد که این کاهش در مقادیر پایین آمونیاک تدریجی بوده، در حالی که با افزایش سهم آمونیاک به بیش از حدود نیمی از ترکیب سوخت، افت دمای بیشینه با شیب بیشتری اتفاق می‌افتد که بیانگر غلبه محدودیت‌های سینتیکی احتراق آمونیاک بر فرآیند انتقال حرارت است. برخلاف پارامترهای هندسی بررسی شده در بخش‌های قبل، تغییر فاصله بین نازل‌های سوخت و هوا بدون تغییر در سرعت و دبی جرمی ورودی انجام شده است؛ بنابراین، تغییرات مشاهده شده در میدان دما تنها ناشی از تغییر نحوه برهم‌کنش دو جت و اصلاح فرآیند اختلاط است. در فواصل کم، دو جت در فاصله کوتاهی پس از ورود به محفظه با یکدیگر برخورد کرده و لایه اختلاط به سرعت تشکیل می‌شود. در نتیجه، شرایط مناسب برای رسیدن به نسبت اختلاط قابل اشتعال در فاصله کوتاهی از ورودی فراهم شده و ناحیه اصلی آزادسازی حرارت در نزدیکی ورودی محفظه شکل می‌گیرد. در مقابل، با افزایش فاصله بین نازل‌ها، هر یک از جت‌ها مسیر طولانی‌تری را به صورت مستقل طی کرده و محل برخورد آن‌ها به سمت پایین دست منتقل می‌شود. این موضوع باعث افزایش طول ناحیه اختلاط و تأخیر در تشکیل مخلوط با نسبت هم‌ارزی مناسب برای احتراق می‌شود. افزایش طول ناحیه اختلاط موجب می‌شود واکنش‌دهنده‌ها پیش از آغاز واکنش‌های شدید، مدت زمان بیشتری را در داخل محفظه سپری کنند. در این بازه زمانی، محصولات احتراق بازچرخش یافته فرصت بیشتری برای نفوذ به لایه اختلاط پیدا کرده و دمای اولیه مخلوط را افزایش می‌دهند، اما هم‌زمان بخشی از اکسیژن موجود در ناحیه واکنش با محصولات احتراق جایگزین می‌شود. بنابراین، اگرچه پیش‌گرمایش واکنش‌دهنده‌ها تسهیل می‌شود، اما کاهش غلظت موضعی اکسیژن و افزایش سهم گازهای بی‌اثر، شدت واکنش‌های گرمازا را محدود می‌کند. در نتیجه، آزادسازی حرارت به جای آنکه در یک ناحیه کوچک متمرکز شود، در طول بیشتری از محفظه توزیع شده و چگالی آزادسازی حرارت کاهش می‌یابد. روند فوق با نتایج گزارش شده در مرجع [۲۷] برای احتراق غیرپیش‌آمیخته متان-هوا نیز همخوانی دارد، هرچند در مخلوط‌های حاوی آمونیاک، به دلیل واکنش‌پذیری کمتر سوخت، شدت این اثر بیشتر مشاهده می‌شود. از سوی دیگر، افزایش فاصله بین نازل‌ها موجب تغییر نحوه توزیع انرژی در محفظه احتراق می‌شود. در فواصل کم، آزادسازی حرارت در حجم نسبتاً کوچکی متمرکز بوده و گرادین‌های دمایی شدیدی در اطراف ناحیه واکنش ایجاد می‌شود. با افزایش فاصله بین نازل‌ها، به دلیل گسترش تدریجی لایه اختلاط، واکنش‌های شیمیایی در حجم بزرگ‌تری از محفظه رخ داده و انتقال حرارت از حالت موضعی به توزیع شده تغییر می‌کند. در نتیجه، علاوه بر کاهش دمای بیشینه، شیب تغییرات دما در امتداد محور محفظه نیز کاهش یافته و میدان دمایی یکنواخت‌تری ایجاد می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که کاهش فاصله نازل‌ها کمتر از یک مقدار مشخص، تأثیر محسوسی بر بیشینه دما و توزیع دمای محفظه ندارد. همچنین برای این هندسه، یک فاصله بحرانی بین نازل‌های سوخت و هوا وجود دارد که در مقادیر کمتر از آن، فرآیند اختلاط دیگر عامل محدودکننده احتراق نیست. به بیان دیگر، پس از آنکه اختلاط اولیه در مدت زمان کوتاهی تکمیل شد، ساختار شعله عمدتاً تحت تأثیر میدان جریان بازچرخشی، انتقال حرارت و سینتیک شیمیایی قرار می‌گیرد و کاهش بیشتر فاصله بین نازل‌ها تنها موجب تغییرات جزئی در موقعیت ناحیه واکنش می‌شود، بدون آنکه اثر قابل ملاحظه‌ای بر دمای بیشینه یا ساختار حرارتی محفظه داشته باشد.

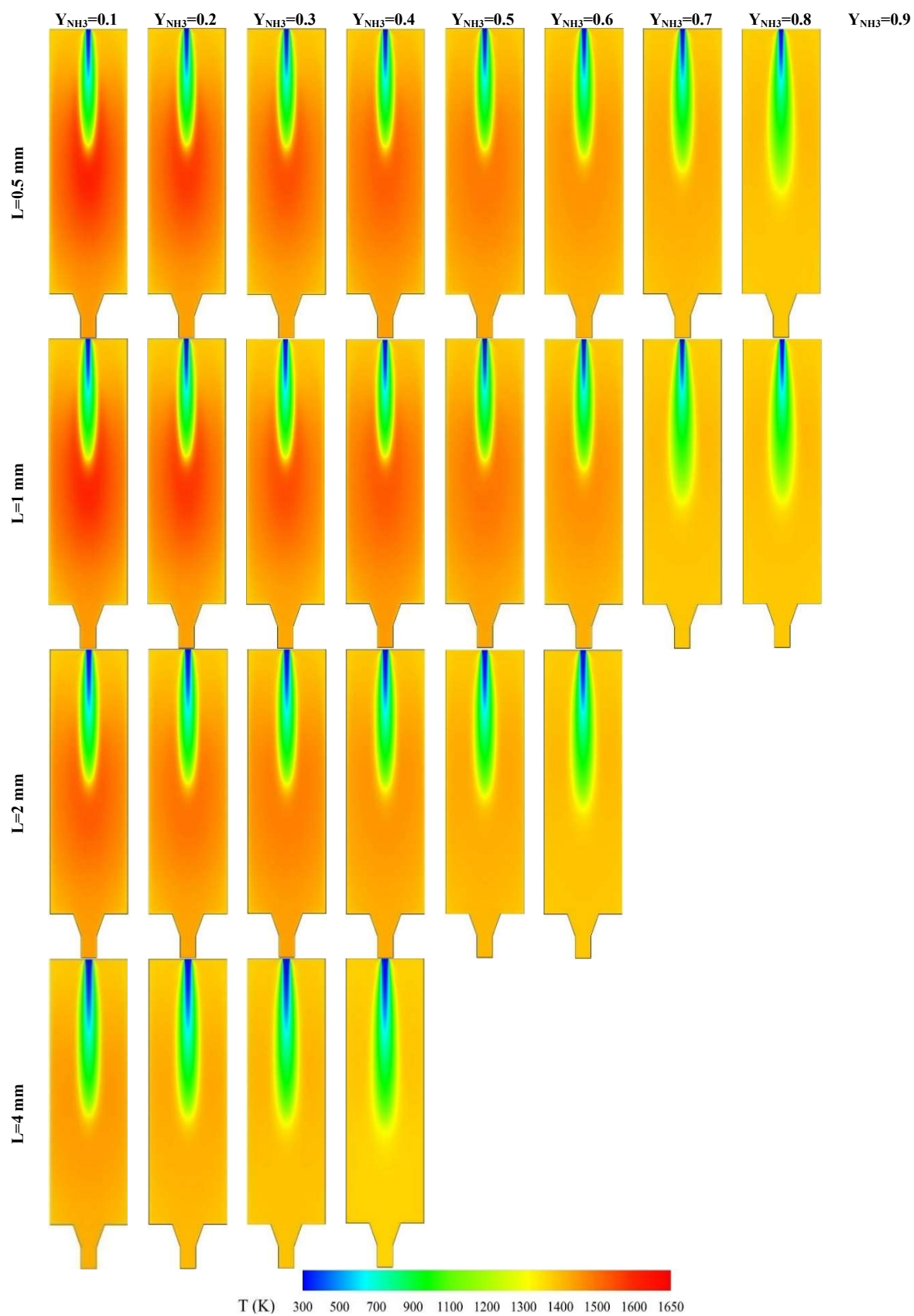


Figure 8- Effect of distance between air and fuel inlets in the different ammonia mass fraction on temperature distribution

شکل ۸- تأثیر فاصله بین ورودی هوا و سوخت در مقادیر مختلف کسر جرمی آمونیاک بر توزیع دما

تأثیر هندسه ورودی بر ساختار و محدوده پایدار عملکرد شعله

معیارهای مختلفی به منظور بررسی ساختار شعله، تاخیر در اشتعال و تعیین محدوده عملکرد پایدار شعله در مطالعات گوناگون مورد استفاده قرار گرفته است. یکی از این معیارها که در مطالعه حاضر نیز مورد توجه قرار گرفته، بررسی تغییرات رادیکال هیدروکسیل به عنوان نشانگر شعله و تشکیل احتراق پایدار است که در بسیاری از مطالعات تجربی و عددی پیشین [۲۸-۳۱] پیرامون سوخت آمونیاک نیز مورد استفاده قرار گرفته است. شکل ۸ کانتور تغییرات رادیکال هیدروکسیل را برای سه قطر نازل سوخت ۳، ۴ و ۶ میلی متر نشان می دهد. در هر یک از قطرهای سوخت به صورت ترکیب هایی با درصدهای مختلف کسر جرمی متان-آمونیاک در نظر گرفته شده است. با توجه به نتایج بدست آمده افزودن آمونیاک به متان منجر به کاهش بیشینه کسر جرمی رادیکال هیدروکسیل درون محفظه شده که عامل اصلی آن کاهش نرخ واکنش ها به علت ارزش حرارتی پایین تر آمونیاک در مقایسه با متان است. همچنین افزودن آمونیاک به متان منجر به کوچکتر شدن ناحیه واکنشی و کاهش حجم شعله است. در یک قطر ثابت با افزایش تزریق آمونیاک به سوخت ابتدا از نرخ واکنش ها کاسته شده و بدون تغییر در محل تشکیل شعله، مقدار کسر جرمی رادیکال هیدروکسیل کاهش می یابد. این کاهش ادامه داشته تا در کسر جرمی مشخصی فاصله محوری شروع واکنش های احتراقی نیز تغییر کرده (افزایش تاخیر در اشتعال) و شعله در فاصله محوری بزرگتری از ورودی محفظه تشکیل می شود. در مطالعه حاضر تغییر در فاصله محوری محل تشکیل شعله برای قطرهای نازل سوخت ۳، ۴ و ۶ میلی متر به ترتیب در کسرهای جرمی تزریق آمونیاک ۰/۷، ۰/۶ و ۰/۵ اتفاق می افتد. با افزایش فاصله محوری ناحیه تشکیل شعله، احتراق به تدریج ناپایدار شده و در نهایت منجر به خاموشی شعله می شود (برای قطرهای مورد بررسی ۳، ۴ و ۶ میلی متر در مطالعه حاضر این اتفاق به ترتیب در کسرهای جرمی تزریق آمونیاک ۰/۹، ۰/۷ و ۰/۵ اتفاق می افتد). براساس کانتورهای رادیکال هیدروکسیل در شکل ۸، افزایش قطر نازل سوخت ورودی در یک کسر جرمی مشخص آمونیاک تزریق شده درون سوخت منجر به افزایش قابل توجه در فاصله محوری محل شروع واکنش های شیمیایی شده و می توان گفت افزایش قطر نازل سوخت منجر به افزایش تأخیر در اشتعال می شود. همچنین قطر نازل کوچکتر سوخت منجر به افزایش حجم شعله شده و ناحیه واکنشی توزیع شده ای را ایجاد می کند که می تواند منجر به افزایش بازدهی احتراق شود. براساس نتایج بدست آمده می توان گفت که کاهش قطر نازل سوخت ورودی یکی از راه های افزایش محدوده تشکیل شعله پایدار در احتراق با سوخت ترکیبی متان-آمونیاک است. برخلاف کانتور رادیکال هیدروکسیل که عمده تاً محل تشکیل شعله و ناحیه واکنش را مشخص می کند، کانتور نرخ آزاد سازی حرارت امکان ارزیابی شدت آزادسازی انرژی و نحوه توزیع آن در حجم محفظه را فراهم می آورد. شکل ۱۰ توزیع نرخ آزادسازی حرارت را برای سه قطر نازل سوخت ۳، ۴ و ۶ میلی متر و در کسرهای جرمی مختلف آمونیاک در سوخت نشان می دهد. همان گونه که مشاهده می شود، افزایش کسر جرمی آمونیاک موجب کاهش قابل توجه بیشینه نرخ آزادسازی حرارت می شود. این رفتار به کاهش واکنش پذیری مخلوط سوخت، سرعت پایین تر اکسیداسیون آمونیاک و کاهش نرخ تشکیل رادیکال های فعال نسبت داده می شود که در نهایت شدت واکنش های گرمازا را محدود می کنند. علاوه بر کاهش مقدار بیشینه HRR، افزایش سهم آمونیاک باعث تغییر توزیع فضایی آزادسازی حرارت نیز می شود. در کسرهای جرمی پایین آمونیاک، ناحیه آزادسازی حرارت همچنان در نزدیکی ورودی محفظه قرار داشته و تنها شدت آن کاهش می یابد، اما با افزایش بیشتر سهم آمونیاک، ناحیه اصلی آزادسازی حرارت به تدریج به سمت پایین دست منتقل می شود. این جابه جایی نشان دهنده افزایش تأخیر اشتعال و نیاز واکنش دهنده ها به زمان بیشتر برای رسیدن به شرایط مناسب آغاز واکنش های شیمیایی است. هم زمان، مقدار بیشینه نرخ آزادسازی حرارت کاهش یافته و آزادسازی انرژی در حجم بزرگتری از محفظه توزیع می شود.

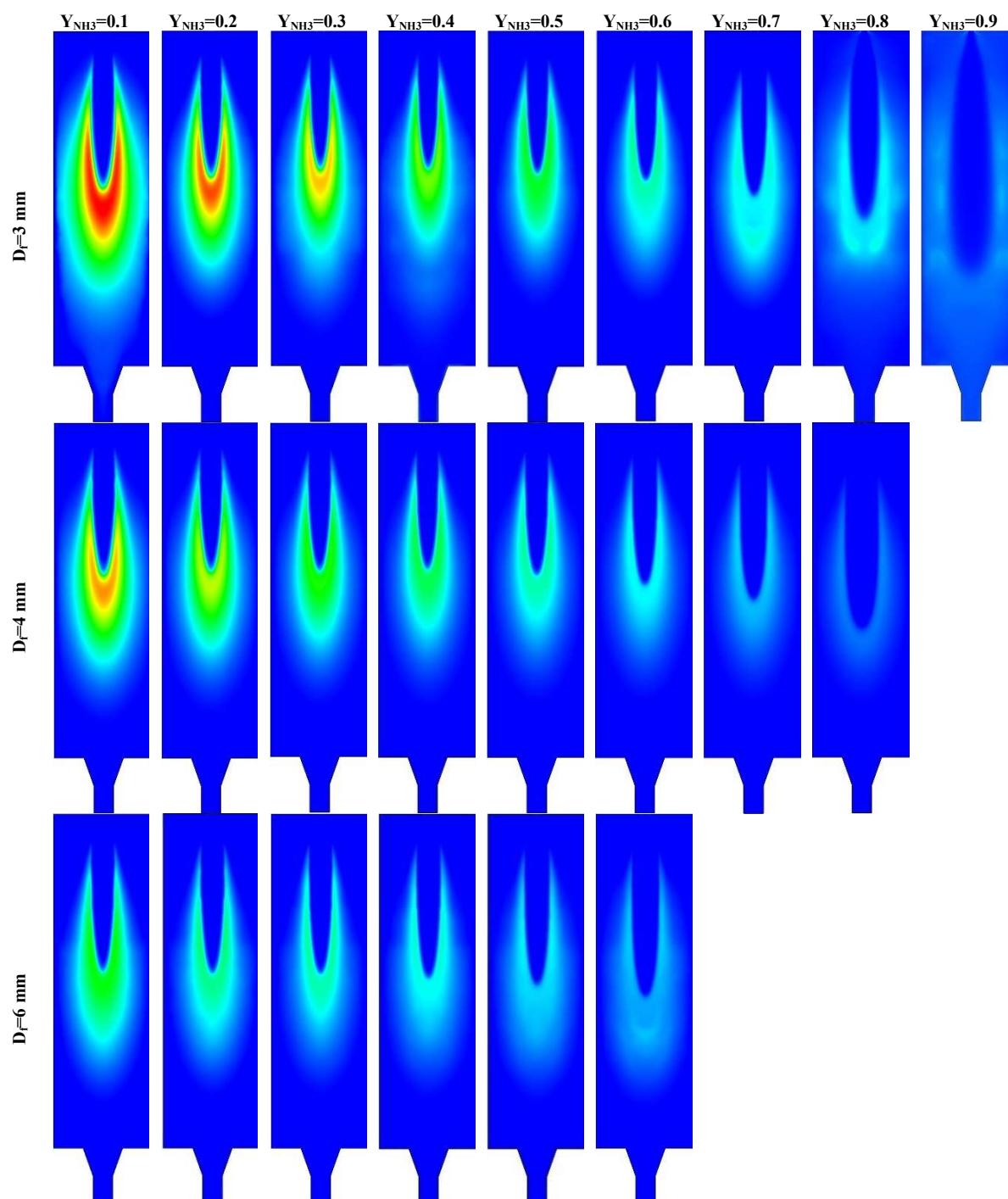


Figure 9- Effect of fuel inlet diameter and different ammonia injection to fuel stream on the hydroxyl radical distribution

شکل ۹- تأثیر قطر ورودی سوخت و مقادیر مختلف تزریق آمونیاک به جریان سوخت روی توزیع رادیکال هیدروکسیل

مقایسه نتایج برای قطرهای مختلف نازل سوخت نیز نشان می‌دهد که با افزایش قطر نازل، ناحیه بیشینه HRR در فاصله محوری بزرگ‌تری از ورودی محفظه تشکیل می‌شود. این رفتار بیانگر آن است که افزایش قطر نازل سوخت موجب افزایش زمان اختلاط و در نتیجه افزایش تأخیر اشتعال می‌شود. علاوه بر این، بیشینه آزادسازی حرارت نیز با افزایش قطر نازل کاهش یافته و توزیع آزادسازی حرارت گسترده‌تر می‌شود. در مقابل، نازل با قطر ۳ میلی‌متر دارای بیشترین مقدار آزادسازی حرارت و

گسترده‌ترین ناحیه آزادسازی حرارت است که نشان‌دهنده وقوع واکنش‌های شیمیایی شدیدتر و توزیع مناسب‌تر انرژی در محفظه احتراق است. بررسی هم‌زمان کانتورهای HRR و رادیکال هیدروکسیل نشان می‌دهد که کاهش شدت آزادسازی حرارت همواره با کاهش غلظت OH و انتقال ناحیه واکنش به سمت پایین‌دست همراه است. از این‌رو، افزایش قطر نازل سوخت و همچنین افزایش سهم آمونیاک، علاوه بر افزایش تأخیر اشتعال، شدت آزادسازی انرژی را نیز کاهش داده و در نهایت محدوده تشکیل شعله پایدار را محدود می‌کنند.

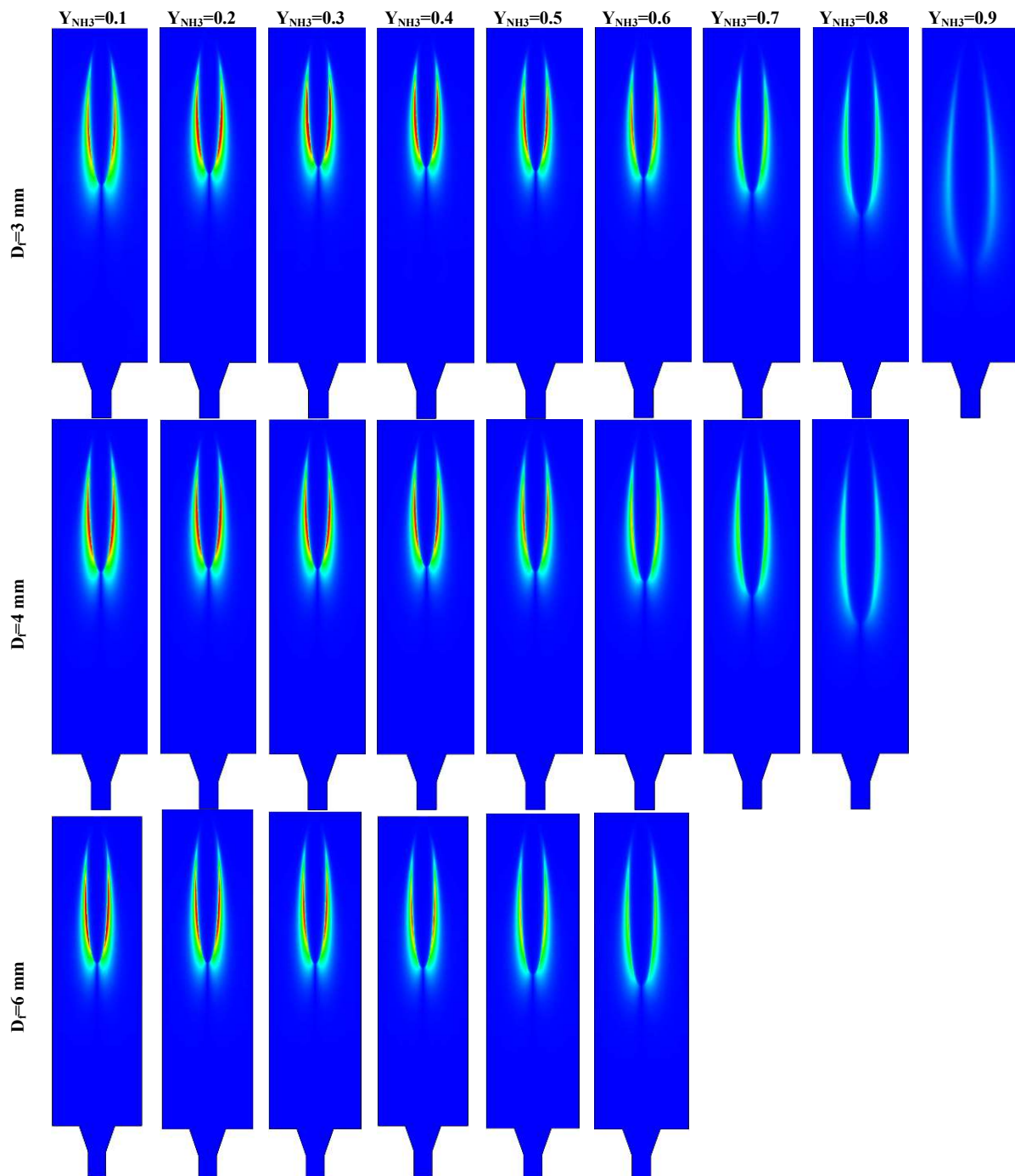


Figure 10- Effect of fuel nozzle on the heat release rate in the different methane-ammonia fuel compositions

شکل ۱۰- تأثیر قطر نازل سوخت بر نرخ آزادسازی حرارت در ترکیب‌های مختلف سوخت متان-آمونیاک

شکل ۱۱ تأثیر قطر نازل هوای ورودی روی تغییرات رادیکال هیدروکسیل را برای ترکیب‌های مختلف سوخت آمونیاک-متان نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش آمونیاک، از بیشینه مقدار رادیکال هیدروکسیل تولید شده به طور قابل توجهی کاسته می‌شود که علت آن به کاهش ارزش حرارتی سوخت ورودی و همچنین رقابت سینتیکی برای رادیکال هیدروکسیل مربوط می‌شود. در شرایط استفاده از مقادیر متان بیشتر در مخلوط سوخت، بخش قابل توجهی از رادیکال هیدروکسیل از طریق واکنش $H + O_2 \leftrightarrow OH + O$ تولید شده در حالی که با افزایش مقدار آمونیاک سوخت، رادیکال هیدروکسیل تولید شده از طریق واکنش ذکر شده از طریق واکنش $NH_3 + OH \leftrightarrow H_2O + NH_2$ برای تولید گونه H_2O مصرف شده و منجر به تشکیل رادیکال NH_2 می‌شود که سطح واکنش‌پذیری بسیار کمتری نسبت به رادیکال هیدروکسیل دارد. این موضوع منجر به کاهش تولید رادیکال هیدروکسیل با افزایش آمونیاک شده که عامل اصلی در کاهش نرخ واکنشی، کاهش حرارت آزاد شده و در نتیجه کاهش دمای شعله است. براساس نتایج بدست آمده در شکل ۱۱، افزایش قطر هوای ورودی منجر به کاهش کسر جرمی رادیکال هیدروکسیل شده و سبب می‌شود تا شعله در مقادیر کسر جرمی آمونیاک تزریقی کمتری ناپایدار و خاموش شود. در شرایط مطالعه حاضر تغییر در فاصله محوری محل شروع واکنش‌های شیمیایی برای قطر هیدرولیکی ورودی هوای ۸، ۱۰ و ۱۲ میلی‌متر به ترتیب در کسرهای جرمی آمونیاک تزریقی ۰/۸، ۰/۷ و ۰/۶ اتفاق می‌افتد که نشان دهنده آن است که با افزایش قطر هیدرولیکی ورودی هوا در سرعت ثابت جریان ورودی، قطر هیدرولیکی بالاتر منجر به دبی هوای ورودی بالاتر شده که این موضوع ضمن افزایش هوای اضافی منجر به بازچرخش شدیدتر محصولات احتراقی شده که اگرچه از یکسو منجر به پیش‌گرمایش مخلوط نسوخته می‌شود اما با توجه به اثرات بیشتر رقیق‌سازی مخلوط نسوخته به وسیله محصولات احتراقی، نرخ واکنش‌ها کاهش یافته و سبب می‌شود تا کسر جرمی رادیکال هیدروکسیل نیز کاهش یابد.

کاهش مقدار رادیکال هیدروکسیل در اثر افزایش سهم آمونیاک، تنها به کاهش غلظت این گونه فعال محدود نمی‌شود، بلکه مستقیماً بر ساختار واکنش و نحوه آزادسازی انرژی در محفظه احتراق نیز تأثیر می‌گذارد. از آنجا که رادیکال OH یکی از گونه‌های کلیدی در مسیرهای اکسیداسیون سوخت‌های هیدروکربنی و همچنین اکسیداسیون آمونیاک است، کاهش حضور آن موجب کاهش سرعت پیشرفت واکنش‌های زنجیره‌ای و محدود شدن تبدیل واکنش‌دهنده‌ها به محصولات احتراقی می‌شود. در نتیجه، با افزایش آمونیاک، ناحیه دارای غلظت بالای OH کاهش یافته و واکنش‌های شیمیایی شدید در حجم کوچک‌تری رخ نمی‌دهند، بلکه آزادسازی انرژی به صورت گسترده‌تر و با شدت کمتر در محفظه توزیع می‌شود. به منظور بررسی دقیق‌تر این رفتار، توزیع نرخ آزادسازی حرارت در شکل ۱۲ ارائه شده است. مقایسه کانتورهای HRR با توزیع رادیکال هیدروکسیل نشان می‌دهد که نواحی با بیشترین مقدار HRR به طور مستقیم با نواحی دارای غلظت بالای OH منطبق هستند. این تطابق بیانگر آن است که تغییرات OH می‌تواند به عنوان شاخص مناسبی برای ارزیابی شدت واکنش‌های گرمازا در احتراق آمونیاک-متان مورد استفاده قرار گیرد. با افزایش کسر جرمی آمونیاک، کاهش غلظت OH سبب کاهش سرعت واکنش‌های زنجیره‌ای و در نتیجه کاهش بیشینه نرخ آزادسازی حرارت می‌شود.

علاوه بر کاهش مقدار بیشینه HRR، افزایش آمونیاک موجب تغییر ساختار فضایی ناحیه آزادسازی حرارت نیز می‌شود. در مخلوط‌های با سهم بیشتر متان، واکنش‌ها در ناحیه‌ای محدودتر و با شدت بالاتر رخ داده و یک ناحیه متمرکز آزادسازی انرژی تشکیل می‌شود. در مقابل، با افزایش سهم آمونیاک، به دلیل محدودیت‌های سینتیکی و کاهش سرعت تشکیل گونه‌های فعال، ناحیه آزادسازی حرارت به سمت پایین‌دست منتقل شده و در حجم بزرگ‌تری از محفظه توزیع می‌شود. این تغییر نشان‌دهنده کاهش شدت موضعی احتراق و افزایش گسترده‌ی ناحیه واکنش است که یکی از ویژگی‌های مطلوب احتراق با رقیق‌سازی بالا و

شرایط نزدیک به MILD محسوب می‌شود. بنابراین، نتایج شکل‌های ۱۱ و ۱۲ نشان می‌دهد که افزایش سهم آمونیاک از طریق تغییر مسیرهای واکنش شیمیایی، کاهش تولید و افزایش مصرف رادیکال OH را به همراه داشته و این موضوع به صورت کاهش نرخ آزادسازی حرارت، کاهش دمای بیشینه و تغییر ساختار شعله در محفظه احتراق ظاهر می‌شود.

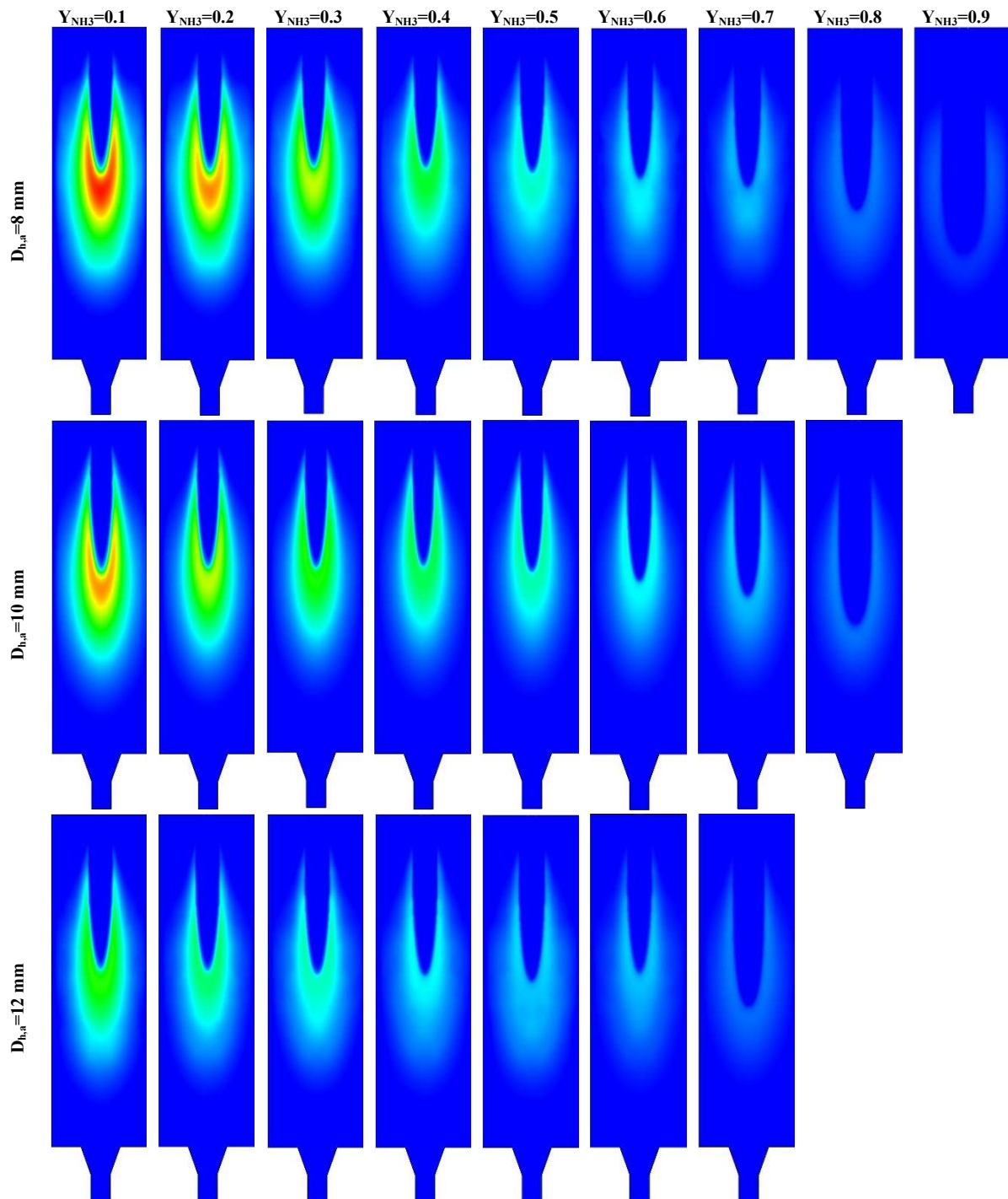


Figure 11- Hydroxyl radical distribution in the different inlet air diameters and different values of ammonia-methane as fuel

شکل ۱۱- توزیع رادیکال هیدروکسیل در قطرهای هوای مختلف ورودی و مقادیر مختلف آمونیاک-متان به عنوان سوخت

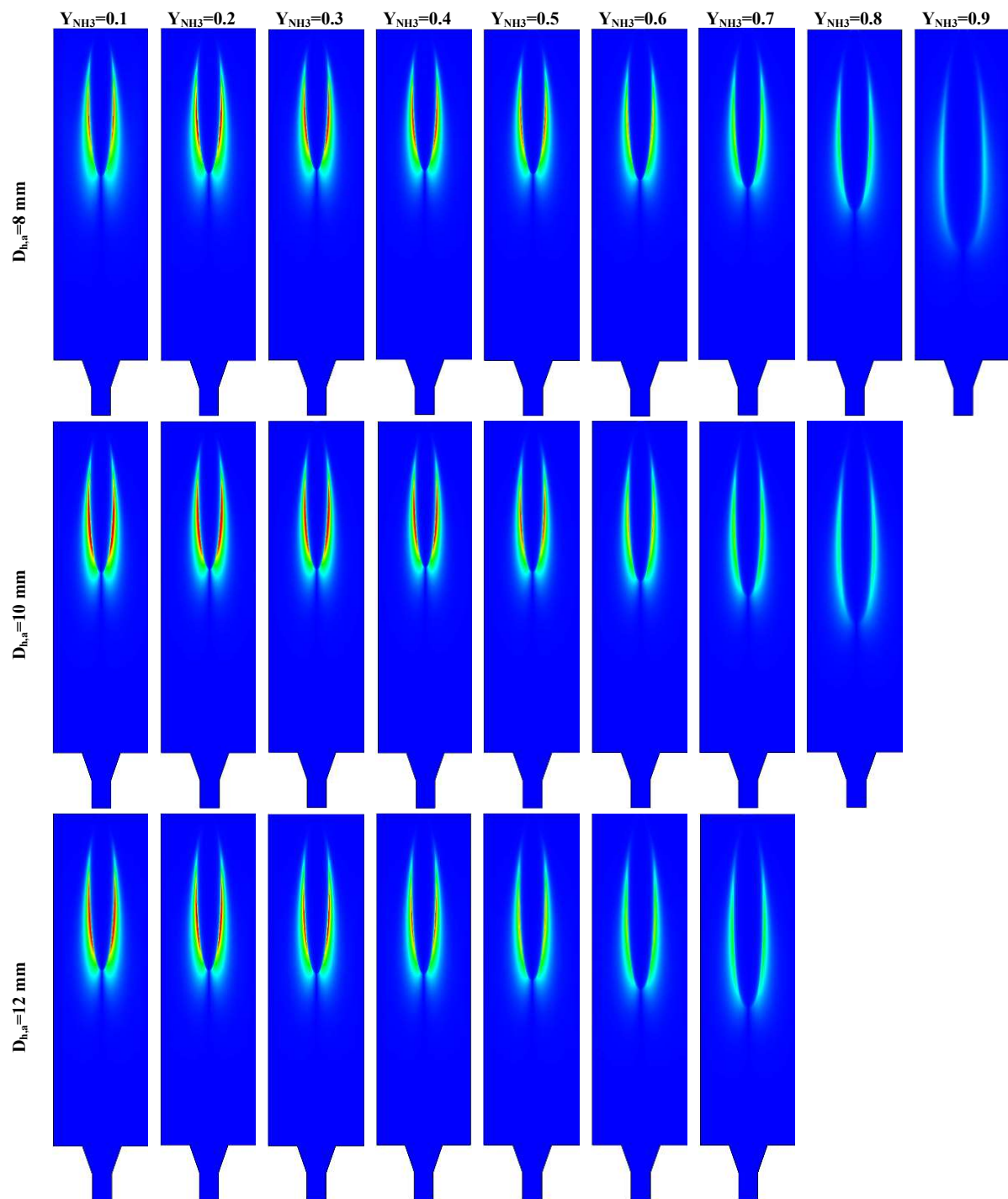


Figure 12- HRR contours in different air inlet diameters and NH_3 added to methane

شکل ۱۲- کانتورهای HRR در قطرهای ورودی هوای مختلف و آمونیاک اضافه شده به متان

شکل‌های ۱۳ و ۱۴ اثر فاصله میان نازل‌های ورودی سوخت و هوا را بر ساختار شعله با استفاده از توزیع رادیکال هیدروکسیل و نرخ آزادسازی حرارت در ترکیب‌های مختلف آمونیاک-متان نشان می‌دهد. نرخ آزادسازی حرارت به‌عنوان یکی از مهم‌ترین شاخص‌های ارزیابی شدت واکنش‌های احتراقی، اطلاعات دقیقی در خصوص محل وقوع واکنش‌های اصلی، میزان تبدیل انرژی

شیمیایی سوخت و تغییرات ناحیه آزادسازی انرژی در محفظه احتراق ارائه می‌دهد. از طرف دیگر، توزیع رادیکال OH به عنوان یک گونه فعال کلیدی در فرآیندهای اکسیداسیون هیدروکربن‌ها و آمونیاک، برای شناسایی ناحیه واکنش، بررسی توسعه شعله و ارزیابی شرایط پایداری آن مورد استفاده قرار گرفته است. ترکیب این دو پارامتر امکان تحلیل هم‌زمان رفتار انرژی‌زایی و ویژگی‌های شیمیایی شعله را فراهم می‌کند. مطابق نتایج، افزایش فاصله میان نازل‌های سوخت و هوا موجب کاهش مقدار بیشینه HRR و کاهش شدت تشکیل OH در ناحیه واکنش می‌شود. در فاصله‌های کوچک‌تر، برهم‌کنش سریع‌تر جریان سوخت و هوا باعث ایجاد ناحیه‌ای با اختلاط مناسب‌تر در مجاورت محل تزریق شده و شرایط مطلوب‌تری برای شروع واکنش‌های زنجیره‌ای فراهم می‌کند. در نتیجه، بیشترین مقدار HRR در یک ناحیه محدودتر ایجاد شده و توزیع OH نیز نشان‌دهنده شکل‌گیری یک ناحیه واکنش فعال‌تر است. با افزایش فاصله نازل‌ها، زمان اختلاط پیش از احتراق افزایش یافته و محل آغاز واکنش‌های شیمیایی به سمت پایین‌دست جابه‌جا می‌شود. این جابه‌جایی که از طریق انتقال ناحیه افزایش HRR و شروع تشکیل OH قابل مشاهده است، بیانگر افزایش تأخیر اشتعال و کاهش سرعت توسعه شعله در ناحیه نزدیک به ورودی‌ها است.

افزایش فاصله میان نازل‌های سوخت و هوا همچنین موجب تغییر در میزان مشارکت محصولات احتراق بازچرخشی در فرآیند اشتعال می‌شود. در شرایط احتراق با رقیق‌سازی بالا، بازچرخش محصولات داغ نقش مهمی در انتقال حرارت و تأمین گونه‌های فعال برای شروع واکنش دارد؛ با این حال، افزایش بیش از حد فاصله نازل‌ها سبب می‌شود مقدار بیشتری از محصولات بازچرخشی پیش از رسیدن مخلوط به شرایط مناسب واکنش، با جریان تازه مخلوط شده و اثر رقیق‌کنندگی آن‌ها افزایش یابد. در نتیجه، غلظت گونه‌های واکنش‌دهنده و احتمال برخوردهای مؤثر شیمیایی کاهش یافته و این موضوع به صورت افت HRR و کاهش مقدار OH در ناحیه شعله ظاهر می‌شود. از سوی دیگر، افزایش سهم آمونیاک در ترکیب سوخت، حساسیت ساختار شعله نسبت به فاصله نازل‌ها را افزایش می‌دهد. اگرچه افزودن آمونیاک به دلیل نقش آن در کاهش انتشار کربن اهمیت زیادی دارد، اما واکنش‌پذیری پایین‌تر آن نسبت به متان، سرعت کمتر مسیرهای واکنشی و نیاز بیشتر به شرایط مناسب برای آغاز احتراق، باعث کاهش شدت آزادسازی انرژی می‌شود. بنابراین، با افزایش کسر جرمی آمونیاک، کاهش نرخ آزادسازی حرارت و محدود شدن ناحیه دارای OH با شدت بیشتری مشاهده می‌شود. این اثر در فواصل بزرگ‌تر میان نازل‌ها تشدید شده و در نهایت باعث کاهش محدوده پایداری شعله و وقوع خاموشی در مقادیر پایین‌تر آمونیاک می‌شود. در مطالعه حاضر، افزایش فاصله محوری شروع واکنش‌ها برای فواصل بین نازل‌های ورودی ۱، ۲ و ۴ میلی‌متر به ترتیب در کسرهای جرمی آمونیاک ۷۰، ۴۰ و ۲۰ درصدی مشاهده شد. همچنین، خاموشی شعله برای این فواصل به ترتیب در کسرهای جرمی آمونیاک بیشتر از ۰/۹، ۰/۷ و ۰/۵ رخ داد. این نتایج نشان می‌دهد که افزایش فاصله میان نازل‌ها نه تنها موجب کاهش شدت واکنش می‌شود، بلکه با انتقال ناحیه فعال شعله به پایین‌دست و کاهش توانایی سیستم در حفظ واکنش‌های زنجیره‌ای، شرایط خاموشی را در ترکیبات با سهم بالاتر آمونیاک فراهم می‌کند.

بر اساس تحلیل هم‌زمان HRR و OH، کاهش فاصله میان نازل‌های سوخت و هوا و همچنین کاهش قطر نازل‌ها در شرایط ثابت بودن توان حرارتی کوره و سرعت هوای ورودی، می‌تواند موجب تقویت فرآیند اختلاط، افزایش شدت واکنش‌های شیمیایی و تثبیت محل تشکیل شعله شود. بنابراین، اصلاح هندسه تزریق یکی از راهکارهای مؤثر برای افزایش قابلیت احتراق مخلوط‌های آمونیاک-متان و دستیابی به سهم بالاتر آمونیاک در سوخت بدون ایجاد ناپایداری یا خاموشی زود هنگام شعله است.

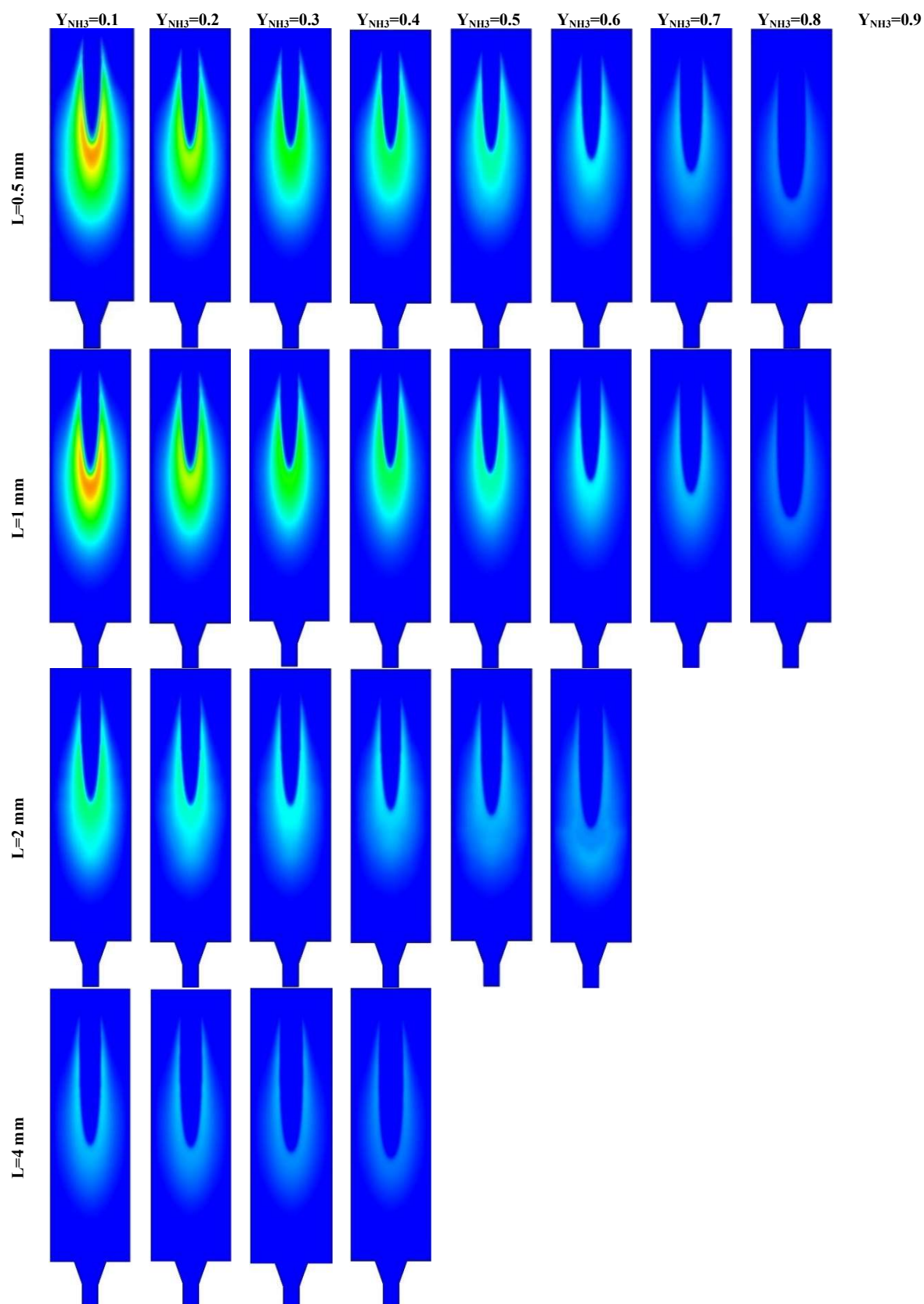


Figure 13- Effect of distance between fuel and air inlets on the hydroxyl distributions

شکل ۱۳- تأثیر فاصله بین ورودی سوخت و هوا بر توزیع هیدروکسیل

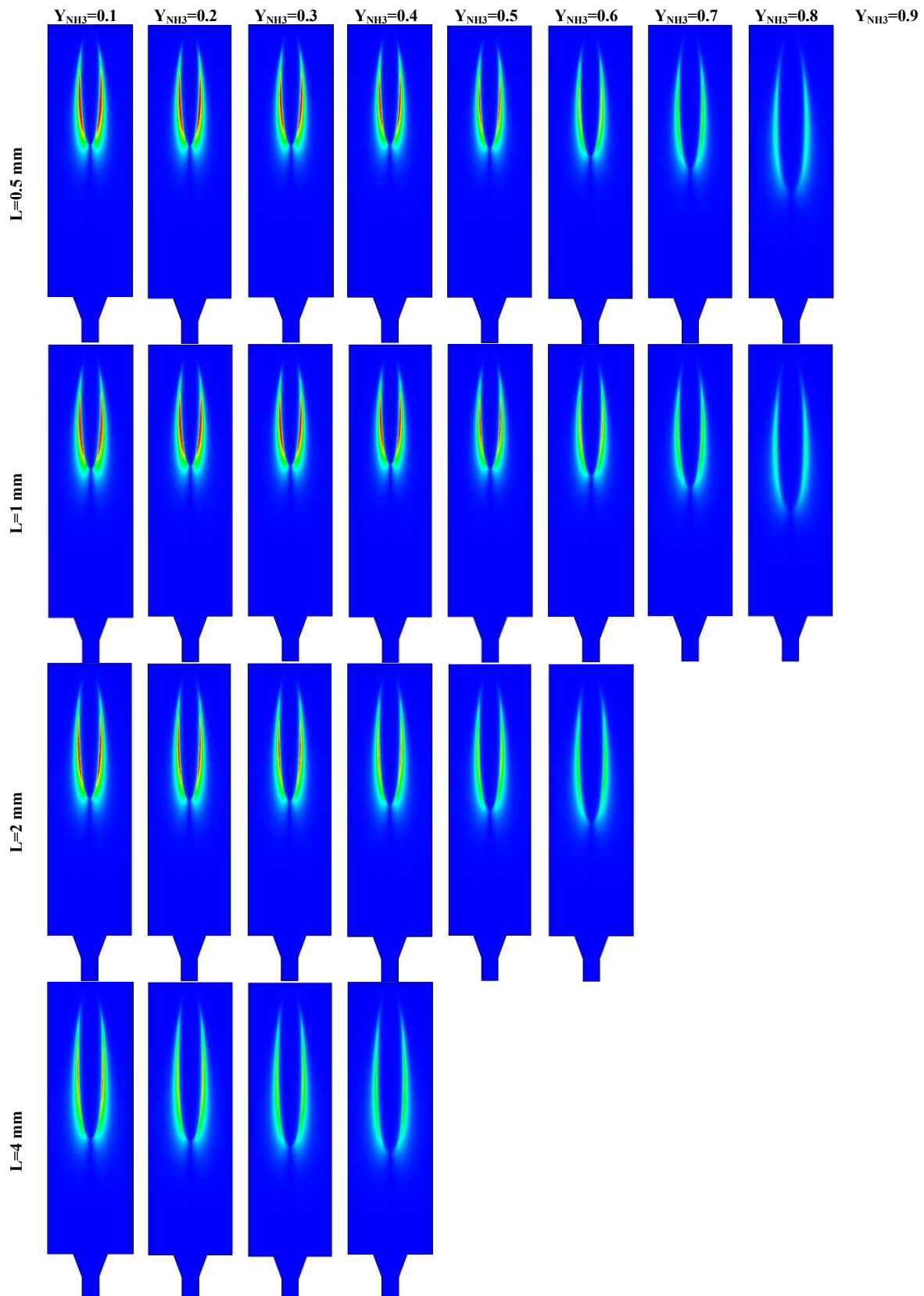


Figure 14- Heat release rate in different distances between inlet nozzles and different values of ammonia injected to fuel

شکل ۱۴- نرخ آزادسازی حرارت در فواصل مختلف میان نازل‌های ورودی و مقادیر مختلف آمونیاک تزریق شده درون سوخت

نتیجه‌گیری

در مطالعه حاضر به کمک شبیه‌سازی عددی کوره احتراقی با مشعل غیرپیش‌آمیخته به بررسی شرایط حرارتی، ساختار شعله و محدوده تشکیل شعله پایدار در احتراق متان-آمونیاک پرداخته شد. بدین منظور مدل‌سازی عددی کوره دانشگاه هواژونگ با توجه به شرایط عملکردی با استفاده از سوخت متان و سوخت ترکیبی آمونیاک-متان مورد توجه قرار گرفت. براساس داده‌های حاصل شده می‌توان گفت که افزودن آمونیاک به سوخت متان به عنوان راهکاری عملی در کاهش انتشار گازهای گلخانه‌ای با چالش‌هایی از جمله کاهش دما درون محفظه و تغییر الگوی حرارتی همراه است که در صورت استفاده در مشعل‌های صنعتی این موضوع باید مورد توجه قرار گیرد. این تغییر در ترکیب سوخت منجر به تغییر در ساختار شعله و کاهش محدوده تشکیل شعله پایدار نیز می‌شود. از این‌رو تغییر در هندسه مشعل برای دستیابی به محدوده پایدار عملکرد شعله و شرایط حرارتی یکسان مورد توجه قرار گرفته است. سه پارامتر هندسی قطر سوخت ورودی، قطر هیدرولیکی ورودی هوا و فاصله میان ورودی سوخت و هوا در مقادیر مختلف کسر جرمی آمونیاک بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهند که در سرعت‌های ثابت هوای ورودی، کاهش قطرهای ورودی سوخت و هوا و همچنین کاهش فاصله میان دو نازل منجر می‌شود تا بتوان در محدوده وسیع‌تری از کسرهای جرمی آمونیاک وارد شده به سوخت بتوان به شعله‌ای پایدار دست پیدا کرد. همچنین تغییر در پارامترهای هندسی ذکر شده می‌تواند به عنوان عاملی اساسی در دستیابی به شرایط حرارتی مشابه با احتراق متان خالص نقش بازی کند. از این‌رو می‌توان گفت که تغییر در این سه پارامتر هندسی نقشی کلیدی در جایگزینی مشعل‌های صنعتی احتراقی متان خالص با سوخت آمونیاک-متان ایفا کرده و راهکاری موثر در تشکیل شرایط احتراقی و حرارتی مشابه است. لازم به ذکر است که در مطالعه حاضر صرفاً نتایج شرایط حرارتی و ساختار شعله مورد تحلیل قرار گرفتند؛ بررسی اثر تغییرات هندسی بر تشکیل آلاینده‌های نیتروژنی، به‌ویژه NO، می‌تواند به‌عنوان یکی از مسیرهای مهم تحقیقات آینده مورد توجه قرار گیرد.

منابع

- [1] J. Pearce-Higgins, L. Antão, R. Bates, K. Bowgen, C. D. Bradshaw, S. Duffield, C. Ffoulkes, A. Franco, J. Geschke, and R. Gregory, "A framework for climate change adaptation indicators for the natural environment," *Ecological Indicators*, vol. 136, p. 108690, 2022.
- [2] J. K. Swim, R. Aviste, M. L. Lengieza, and C. J. Fasano, "OK Boomer: A decade of generational differences in feelings about climate change," *Global Environmental Change*, vol. 73, p. 102479, 2022.
- [3] A. Valera-Medina, M. Viguera-Zuniga, H. Shi, S. Mashruk, M. Alnajideen, A. Alnasif, J. Davies, Y. Wang, X. Zhu, and W. Yang, "Ammonia combustion in furnaces: A review," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 49, pp. 1597–1618, 2024.
- [4] S. Liguori, K. Kian, N. Buggy, B. H. Anzelmo, and J. Wilcox, "Opportunities and challenges of low-carbon hydrogen via metallic membranes," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 80, p. 100851, 2020.
- [5] S. Saeidi, S. Najari, V. Hessel, K. Wilson, F. J. Keil, P. Concepción, S. L. Suib, and A. E. Rodrigues, "Recent advances in CO₂ hydrogenation to value-added products—Current challenges and future directions," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 85, p. 100905, 2021.
- [6] A. Valera-Medina, F. Amer-Hatem, A. K. Azad, I. Dedoussi, M. De Joannon, R. Fernandes, P. Glarborg, H. Hashemi, X. He, and S. Mashruk, "Review on ammonia as a potential fuel: from synthesis to economics," *Energy & Fuels*, vol. 35, no. 9, pp. 6964–7029, 2021.
- [7] C. Zamfirescu and I. Dincer, "Using ammonia as a sustainable fuel," *Journal of Power Sources*, vol. 185, no. 1, pp. 459–465, 2008.
- [8] A. Valera-Medina, H. Xiao, M. Owen-Jones, W. I. David, and P. J. Bowen, "Ammonia for power," *Progress in Energy and combustion science*, vol. 69, pp. 63–102, 2018.
- [9] G. B. Ariemma, G. Sorrentino, R. Ragucci, M. de Joannon, and P. Sabia, "Ammonia/Methane combustion: stability and NO_x emissions," *Combustion and Flame*, vol. 241, p. 112071, 2022.

- [10] Z. An, R. Wang, R. Mao, J. Xing, M. Zhang, Z. X. Chen, and R. Kurose, "Flame stability and emission characteristics of oxygen-enriched ammonia combustion in a swirl combustor," *Energy*, vol. 324, p. 135829, 2025.
- [11] S. Colson, M. Kuhn, A. Hayakawa, H. Kobayashi, C. Galizzi, and D. Escudié, "Stabilization mechanisms of an ammonia/methane non-premixed jet flame up to liftoff," *Combustion and Flame*, vol. 234, p. 111657, 2021.
- [12] S. N. Najafi, A. Mokhov, and H. Levinsky, "Investigation of the stability, radiation, and structure of laminar coflow diffusion flames of CH₄/NH₃ mixtures," *Combustion and Flame*, vol. 244, p. 112282, 2022.
- [13] A. Valera-Medina, D. Pugh, P. Marsh, G. Bulat, and P. Bowen, "Preliminary study on lean premixed combustion of ammonia-hydrogen for swirling gas turbine combustors," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 42, no. 38, pp. 24495–24503, 2017.
- [14] E. C. Okafor, H. Yamashita, A. Hayakawa, K. K. A. Somarathne, T. Kudo, T. Tsujimura, M. Uchida, S. Ito, and H. Kobayashi, "Flame stability and emissions characteristics of liquid ammonia spray co-fired with methane in a single stage swirl combustor," *Fuel*, vol. 287, p. 119433, 2021.
- [15] A. Valera-Medina, R. Marsh, J. Runyon, D. Pugh, P. Beasley, T. Hughes, and P. Bowen, "Ammonia–methane combustion in tangential swirl burners for gas turbine power generation," *Applied Energy*, vol. 185, pp. 1362–1371, 2017.
- [16] H. Xiao, A. Valera-Medina, and P. J. Bowen, "Study on premixed combustion characteristics of co-firing ammonia/methane fuels," *Energy*, vol. 140, pp. 125–135, 2017.
- [17] J. Li, H. Huang, L. Deng, Z. He, Y. Osaka, and N. Kobayashi, "Effect of hydrogen addition on combustion and heat release characteristics of ammonia flame," *Energy*, vol. 175, pp. 604–617, 2019.
- [18] S. Xu, Z. Tian, Q. Dou, Y. Tu, Y. Fu, and H. Liu, "Performance improvement of methane oxy-MILD combustion with high initial oxygen contents using a novel non-premixed oxygen/recycled flue gas jet burner," *Energy & Fuels*, vol. 38, no. 4, pp. 3382–3398, 2024.
- [19] S. Xu, Z. Tian, Y. Chen, S. Liang, Y. Tu, and H. Liu, "Effect of hydrogen-blending ratio and wall temperature on establishment, NO formation, and heat transfer of hydrogen-enriched methane MILD combustion," *Fuel*, vol. 369, p. 131787, 2024.
- [20] M. Xie, Y. Tu, and Q. Peng, "Numerical study of NH₃/CH₄ MILD combustion with conjugate heat transfer model in a down-fired lab-scale furnace," *Applications in Energy and Combustion Science*, vol. 14, p. 100144, 2023.
- [21] M. Wolfshtein, "The velocity and temperature distribution in one-dimensional flow with turbulence augmentation and pressure gradient," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 12, no. 3, pp. 301–318, 1969.
- [22] N. El Gharbi, R. Absi, A. Benzaoui, and R. Bennacer, "An improved near-wall treatment for turbulent channel flows," *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, vol. 25, no. 1, pp. 41–46, 2011.
- [23] D. M. G. Gregory P. Smith, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr., Vitali V. Lissianski, and Zhiwei Qin. "http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/." (accessed 2026/13/06, 2026).
- [24] T. Mendiara and P. Glarborg, "Ammonia chemistry in oxy-fuel combustion of methane," *Combustion and Flame*, vol. 156, no. 10, pp. 1937–1949, 2009.
- [25] P. Glarborg, J. A. Miller, B. Ruscic, and S. J. Klippenstein, "Modeling nitrogen chemistry in combustion," *Progress in energy and combustion science*, vol. 67, pp. 31–68, 2018.
- [26] X. Zhang, S. P. Moosakutty, R. P. Rajan, M. Younes, and S. M. Sarathy, "Combustion chemistry of ammonia/hydrogen mixtures: Jet-stirred reactor measurements and comprehensive kinetic modeling," *Combustion and Flame*, vol. 234, p. 111653, 2021.
- [27] E. E. Fordoei, K. Mazaheri, and A. Mohammadpour, "Effects of hydrogen addition to methane on the thermal and ignition delay characteristics of fuel-air, oxygen-enriched and oxy-fuel MILD combustion," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 46, no. 68, pp. 34002–34017, 2021.
- [28] M. J. Bedard, T. L. Fuller, S. Sardeshmukh, and W. E. Anderson, "Chemiluminescence as a diagnostic in studying combustion instability in a practical combustor," *Combustion and Flame*, vol. 213, pp. 211–225, 2020.
- [29] L. He, Q. Guo, Y. Gong, F. Wang, and G. Yu, "Investigation of OH* chemiluminescence and heat release in laminar methane–oxygen co-flow diffusion flames," *Combustion and Flame*, vol. 201, pp. 12–22, 2019.
- [30] Y. Liu, J. Tan, M. Wan, L. Zhang, and X. Yao, "Quantitative measurement of OH* and CH* chemiluminescence in jet diffusion flames," *ACS omega*, vol. 5, no. 26, pp. 15922–15930, 2020.
- [31] D. Chen, J. Li, X. Li, Y. Guo, H. Huang, and N. Kobayashi, "Experimental studies on the OH* chemiluminescence and structure characteristics in NH₃/H₂ and NH₃/cracked gas swirl flames," *International journal of hydrogen energy*, vol. 52, pp. 1370–1379, 2024.