

Amirkabir Journal of Mechanical Engineering

Amirkabir J. Mech. Eng., 52(2) (2020) 81-84 DOI: 10.22060/mej.2018.13901.5749



Chemical and Physical Effects of Carbon Dioxide Injection with Different Preheating Temperature in Flameless Combustion

E. Ebrahimi Fordoei and K. Mazaheri*

Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

ABSTRACT: The purpose of the present study is the numerical simulation of the flameless burner with carbon dioxide injection into the oxidizer stream using OpenFOAM software. Also, the effect of different amounts of oxidizer preheating temperature has been studied. In order to perform simulations from the partially stirred reactor combustion model, the standard k- ϵ turbulence model with modified coefficients and discrete phase radiation model with the calculation of adsorption and emission coefficients using weighted sum of gray gases mode model with non-gray gas coefficients have been used. The results of the present study indicate that the physical effects of carbon dioxide degradation will reduce the amount of heat release and the amount of carbon monoxide produced, while the chemical effects of this injection result in a significant increase in these amounts. Increasing the mass fraction of injection from 0.25 to 0.75 leads to a change in the maximum mass fraction of carbon monoxide produced from 0.05 to 0.072. Also, the chemical effect of the injection changes the flame structure and increased carbon monoxide emissions by increasing the preheating temperature. The chemical effect of carbon dioxide injection on the production of NOx pollutants is such that, with increasing temperature, the amount of NOx emission is increased.

Review History:

Received: 02/01/2018 Revised: 09/01/2018 Accepted: 24/06/2018 Available Online: 30/06/2018

Keywords:

Flameless combustion Physical and chemical effect Carbon dioxide injection Flame structure Pollution distribution

1. INTRODUCTION

Flameless combustion is one of the combustion regimes based on the strong recirculation of the combustion products into the oxidizer to dilute and pre-heat the reacting mixture. Therefore, the structure of the oxidizer plays a major role in the heat transfer and flame structure in this combustion process. Extensive studies have been done on the effect of oxidizer structures on the flameless combustion. Tu and et al. [1] examined the physical and chemical effects of Carbon dioxide (CO₂) injections into the hot co-flow in the flameless combustion burner. The results show that the replacement of CO_2 with N₂ causes delayed ignition of oxyfuel combustion.

In the present study, the physical (specific heat capacity, radiation properties, molecular mass, density and molecular diffusion coefficients of carbon dioxide in comparison with nitrogen) and chemical (active carbon dioxide in chemical reactions compared with nitrogen) effects of replacement of CO_2 by N_2 has been investigated. In addition, the oxidizer pre-heating temperature effects have been discussed on the physical and chemical effects of carbon dioxide injections.

2. COMPUTATIONAL DETAILS

In order to perform the numerical simulations, flameless combustion burner made by Dally et al. [2] has been used.

*Corresponding author's email: kiumars@modares.ac.ir

In accordance with Fig. 1, the axisymmetric computational domain is used for the simulations. The governing boundary conditions are shown in Fig. 1 and these applied in accordance with Table 1.

OpenFOAM software has been used to perform numerical simulations. The standard k- ε model was used with the modified coefficient C_{ε 1} from 1.44 to 1.6. In addition, for the modeling interactions of turbulence and chemistry of reactions, the Partially Stirred Reactor (PaSR) combustion model has been used.

Discrete Ordinate (DO) model is used to calculation of radiative heat transfer. Also, the GRI2.11 chemical mechanisms have been used due to better prediction of the temperature and combustion species distribution (especially NOx) [3].

The PIMPLE algorithm is used for the elimination of coupling between velocity and pressure. The convergences criteria of the solution also take into account the residuals of all equations equal to 10⁻⁷.



Copyrights for this article are retained by the author(s) with publishing rights granted to Amirkabir University Press. The content of this article is subject to the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY-NC 4.0) License. For more information, please visit https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode.

No.	T _{product} (K)	Co-flow Mass Fraction (%)	Tunnel Air Mass Fraction (%)
1	1300	O ₂ =3, CO ₂ =5.5, H ₂ O=6.5, N ₂ =85, XCO ₂ =0	O ₂ =23, CO ₂ =0, H ₂ O=0, N ₂ =77, XCO ₂ =0
2	1300	O ₂ =6, CO ₂ =5.5, H ₂ O=6.5, N ₂ =82, XCO ₂ =0	O ₂ =23, CO ₂ =0, H ₂ O=0, N ₂ =77, XCO ₂ =0
3	1300	O ₂ =9, CO ₂ =5.5, H ₂ O=6.5, N ₂ =79, XCO ₂ =0	O ₂ =23, CO ₂ =0, H ₂ O=0, N ₂ =77,XCO ₂ =0
4	1300	O ₂ =3 , CO ₂ =0 , H ₂ O=0 , N ₂ =97 , XCO ₂ =0	O ₂ =23, CO ₂ =0, H ₂ O=0, N ₂ =77, XCO ₂ =0
5	1300	O ₂ =3 , CO ₂ =25 , H ₂ O=0 , N ₂ =72 , XCO ₂ =0	O ₂ =23, CO ₂ =25, H ₂ O=0, N ₂ =52, XCO ₂ =0
5X	1300	O ₂ =3 , CO ₂ =0 , H ₂ O=0 , N ₂ =72 , XCO ₂ =25	O ₂ =23, CO ₂ =0, H ₂ O=0, N ₂ =52, XCO ₂ =25
6	1300	O ₂ =3, CO ₂ =50, H ₂ O=0, N ₂ =47, XCO ₂ =0	O ₂ =23, CO ₂ =50, H ₂ O=0, N ₂ =27, XCO ₂ =0
6X	1300	O ₂ =3 , CO ₂ =0 , H ₂ O=0 , N ₂ =47 ,XCO ₂ =50	O ₂ =23, CO ₂ =0, H ₂ O=0, N ₂ =27, XCO ₂ =50
7	1300	O ₂ =3, CO ₂ =75, H ₂ O=0, N ₂ =22, XCO ₂ =0	O ₂ =23, CO ₂ =75, H ₂ O=0, N ₂ =2, XCO ₂ =0
7X	1300	O ₂ =3 , CO ₂ =0 , H ₂ O=0 , N ₂ =22 ,XCO ₂ =75	O ₂ =23, CO ₂ =0, H ₂ O=0, N ₂ =2,XCO ₂ =75
8	1100	O ₂ =3 , CO ₂ =0 , H ₂ O=0 , N ₂ =97 ,XCO ₂ =0	O ₂ =23 , CO ₂ =50 , H ₂ O=0 , N ₂ =27 ,XCO ₂ =0
9	1100	O ₂ =3, CO ₂ =50, H ₂ O=0, N ₂ =47,XCO ₂ =0	O ₂ =23 , CO ₂ =50 , H ₂ O=0 , N ₂ =27 ,XCO ₂ =0
9XT	1100	O ₂ =3 , CO ₂ =0 , H ₂ O=0 , N ₂ =47 ,XCO ₂ =50	O ₂ =23, CO ₂ =0, H ₂ O=0, N ₂ =2,XCO ₂ =50

Table 1. The governing boundary conditions

3. RESULTS AND DISCUSSION

The grid independency results show that the network with 42550 cells has independent results for the simulations.

The results of the solver validation are presented. An average error of 10% indicates a good agreement between the results with experimental data (Fig. 2).

As shown in Fig. 3, the physical effect of CO_2 injection leads to a significant reduction in the maximum Hydroxyl (OH) mass fraction, which increases with an increase in CO_2 injection. decreasing of OH produced is due to higher heat absorption by CO_2 injection due to its higher heat capacity than nitrogen. The chemical effect of CO_2 injection is such that it leads to an increase in the OH mass fraction through the reaction $H + O_2 \leftrightarrow O + OH$.



Fig. 2. Temperature variation in 90 cm from inlets



Fig. 3. OH distribution in 90 cm from inlets in different CO₂ mass fraction injection



Fig. 4: NOx distribution in 90 cm from inlets in different CO₂ mass fraction injection



Fig. 5: Effect of co-flow pre-heating temperature on the CO₂ injection in oxidizer on OH distribution

The effects of CO_2 injection into the oxidizer is shown in Fig. 4. As can be seen, injection of high levels of carbon dioxide, physically and chemically, results in a reduction in the mass fraction of NOx. while CO_2 injection equals 25% of the oxidizer mass fraction of different physical and chemical behaviors. In this case, the physical effect of the injection results in a reduction in the NOx production due to a decrease in the maximum temperature and also a reduction in the amount of nitrogen available for the production of NOx, while the HCN behavior results in a significant increase in the production of NOx.

The OH mass fraction increases in higher preheating temperature. The increase in temperature led to a further dissociation of H_2O through the reaction of $OH + H_2 \leftrightarrow H + H_2O$, which increases the hydroxyl produced.

The physical impact of the injection of CO₂ into oxidizer leads to a significant decrease in NOx emissions due to a reduction in the maximum temperature. Contrary to the physical effect, the chemical effect of carbon dioxide injections results in an increase in the amount of NOx released. This issue is due to the presence of CO₂ in the reaction N₂ + CO₂ \leftrightarrow NO + NCO (Fig. 6).



Fig. 6. Effect of coflow pre-heating temperature on the CO₂ injection in oxidizer on NOx distribution

4. CONCLUSION

The important results of the chemical and physical effects of CO_2 added to oxidizer in different preheating temperature into the Flameless burner are included: The increase in the amount of CO_2 injected leads to a decrease in the rate of reactions by reducing the concentration of radical hydroxyl. In addition, with increasing injection rates due to the decrease in maximum temperature, NOx contamination levels are significantly reduced; increasing the oxidizer pre-heating temperature increases the chemical effect of CO_2 injection into the oxidizer stream.

REFERENCES

- Y. Tu, H. Liu, W. Yang, Flame Characteristics of CH₄/H₂ on a Jet-in-Hot-Coflow Burner Diluted by N₂, CO₂, and H₂O, Energy & Fuels, 31(3) (2017) 3270-3280.
- [2] B.B. Dally, A. Karpetis, R. Barlow, Structure of turbulent non-premixed jet flames in a diluted hot coflow, Proceedings of the combustion institute, 29(1) (2002) 1147-1154.
- [3] C. Bowman, R. Hanson, W. Gardiner, V. Lissianski, M. Frenklach, M. Goldenberg, G. Smith, GRI-Mech 2. 11: An Optimized Detailed Chemical Reaction Mechanism for Methane Combustion and NO Formation and Reburning, NASA, (19980005146) (1997).

This page intentionally left blank

نشريه مهندسي مكانيك اميركبير

تشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر، دوره ۵۲، شماره ۲، سال ۱۳۹۹، صفحات ۳۱۱ تا ۳۲۸ DOI: 10.22060/mej.2018.13901.5749

نشریه مهندسی مکانیک او 5749

بررسی تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسیدکربن با مقادیر پیشگرمایش مختلف در احتراق بدون شعله

اسماعیل ابراهیمی فردویی، کیومرث مظاهری*

دانشکده مهندسی مکانیک، تربیت مدرس، تهران، ایران

خلاصه: هدف از مطالعه حاضر شبیه سازی عددی مشعل بدون شعله همراه با تزریق دی اکسید کربن درون جریان اکسید کننده با استفاده از نرم افزار متن باز اپن فوم است. همچنین اثر مقادیر مختلف دمای پیش گرمایش اکسید کننده در آن مورد مطالعه قرار گرفته است. به منظور انجام شبیه سازی ها از مدل احتراقی پی.آ.اس.آر، مدل آشفتگی کا اپسیلون استاندارد با ضرایب اصلاح شده و همچنین مدل تشعشعی فاز گسسته همراه با محاسبه ضرایب جذب و گسیل با استاندارد مدل دبلیواس.جی.جی.ام با ضرایب گاز غیر خاکستری استفاده شده است. نتایج بدست آمده از مطالعه حاضر نشان دهنده آن است که اثرات فیزیکی ناشی از تزریق دی اکسید کربن منجر به کاهش میزان آزادسازی حرارت و میزان می شود. افزایش میزان کسر جرمی تزریق از کا⁽⁾ به ۲۵/۰ منجر به تغییر بیشینه کسر جرمی مونوکسید کربن تولید شده از ۲۰/۰ به ۲۰۷۲ می مود. همچنین با افزایش دمای اکسید کنده بر تاثیر شیمیایی تزریق بر روی ساختار شعله و انتشار آلاینده مونوکسید کربن افزوده می شود. همچنین تاثیر شیمیایی تزریق دی اکسید کربن بر روی ساختار شعله و انتشار می شود. افزایش میزان کسر جرمی تزریق از ۲۵/۰ به ۲۵/۰ منجر به تغییر بیشینه کسر جرمی مونوکسید کربن تولید شده آلاینده مونوکسید کربن افزوده می شود. همچنین با افزایش دمای اکسید کنده بر تاثیر شیمیایی تزریق بر روی ساختار شعله و انتشار

تاریخچه داوری: دریافت: ۱۳۹۶/۱۰/۱۲ بازنگری: ۱۳۹۶/۱۰/۱۹ پذیرش: ۱۳۹۷/۰۴/۰۳ ارائه آنلاین: ۱۳۹۷/۰۴/۰۹

کلمات کلیدی: احتراق بدون شعله تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن ساختار شعله توزیع آلاینده

جداسازی و کاهش انتشار دی کسید کربن به عنوان اصلی ترین گاز

گلخانهای، استفاده از احتراق سوخت اکسیژن و استفاده از حلالهای

شیمیایی میباشد که استفاده از حلالها در احتراق سوخت-هوا مورد

توجه قرار دارد [۶]. در این روشها دی کسید کربن از محصولات

احتراقی جدا گردیده و به منظور به کارگیری در سایر کاربردها

مورد استفاده قرار می گیرد. یکی از موارد استفاده از دی اکسید

كربن بازچرخش آن به درون محفظه احتراق از طريق تركيب آن با

اکسیدکننده میباشد [۶ و ۷]. اضافه نمودن دیاکسید کربن درون

اکسیدکننده و جایگزینی آن با نیتروژن با توجه به تفاوتهای فیزیکی

آنها با یکدیگر و همچنین مشارکت دیاکسید کربن در واکنشهای

شیمیایی منجر به تفاوتهای اساسی در فرآیند احتراق میگردد

[۸]. از اینرو مطالعات گستردهای پیرامون اثرات فیزیکی و شیمیایی

تزریق دیاکسید کربن انجام شده است. وانگ و همکاران [۹] به

مطالعه عددی اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن بر

روی احتراق متان با استفاده از حلگر شعله غیر پیش آمیخته جریان

۱– مقدمه

احتراق بدون شعله یکی از فرآیندهای نوین احتراقی است که در سالهای اخیر به عنوان یکی از بهترین روشها جهت کاهش آلاینده ناکس همزمان با افزایش بازدهی سیستمهای احتراقی در صنایع مختلف مورد استفاده قرار گرفته است [۱ و ۲]. یکی از الزامات جهت دستیابی به این فرآیند احتراقی، رسیدن دمای مخلوط سوخت و هوا پیش از وقوع فرآیند احتراق به دمای خوداشتعالی آن و کاهش غلظت اکسیژن در ناحیه واکنشی به وسیله بازچرخش محصولات احتراقی میباشد [۵-۲]. عمده محصول فرآیند احتراق سوخت-هوا استفاده قرار میگیرد، نیتروژن میباشد که گازی خنثی بوده و در واکنشهای شیمیایی شرکت نمیکند. در سالهای اخیر با توجه به مسئله گرمایش جهانی در اثر انتشار گازهای گلخانهای، کاهش انتشار این گازها مورد توجه محققین قرار گرفته است. دو روش عمده جهت

* نویسنده عهدهدار مکاتبات: kiumars@moares.ac.ir

ر دو مؤلفین به نویسندگان و حقوق ناشر به انتشارات دانشگاه امیر کبیر داده شده است. این مقاله تحت لیسانس آفرینندگی مردمی (Creative Commons License) در دسترس شما قرار گرفته است. برای جزئیات این لیسانس، از آدرس https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode دیدن فرمائید.

متقابل^۱ پرداختند. در این بررسی مشاهده شد که اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن منجر به کاهش دمای بیشینه شعله میشود. علاوهبر این نتایج بدست آمده از این بررسی نشاندهنده افزایش میزان تولید مونوکسید کربن در نتیجه تاثیر شیمیایی تزریق میباشد، در حالی که اثرات فیزیکی تزریق منجر به کاهش میزان انتشار مونوکسید کربن تولیدی می گردد. چن و همکاران [۱۰] نیز به مطالعه عددی تاثیر شرایط رقیقسازی با استفاده از دیاکسید کربن و آب بر احتراق سوخت-اکسیژن بدون شعله پرداختند. در این مطالعه مشاهده شد که در شرایط استفاده از دیاکسید کربن و آب به عنوان بخشی از اکسیدکننده، با کاهش غلظت اکسیژن در سمت اکسیدکننده به کمتر از ۶ درصد کسر جرمی و یا کاهش دمای گرفت. همچنین تزریق آب منجر به ایجاد شعلهای کوتاهتر نسبت به حالت تزریق دیاکسید کربن می گردد.

تو و همکاران [۸] به بررسی اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن درون جریان محصولات داغ احتراقی با استفاده از مشعل جی.اچ.سی²با ورودی اصلاح شده در احتراق سوخت-اکسیژن بدون شعله پرداختند. در این مطالعه محدوده حل عددی با توجه به مطالعه صورت گرفته در مرجع [۱۱] تنها شامل ورودی سوخت و محصولات بازچرخش یافته احتراقی بود. نتایج بدست آمده از این مطالعه نشان میدهند که جایگزینی دیاکسید کربن با نیتروژن سبب میشود تا اشتعال در احتراق سوخت-اکسیژن با تاخیر مواجه شود؛ همچنین این تزریق منجر میشود تا توزیع دمای یکنواختتری نسبت به حالت احتراق سوخت-هوای بدون شعله ایجاد شود که این موضوع به علت ظرفیت حرارتی بالای دیاکسید کربن در جذب و سپس آزادسازی حرارت در محدوده حل عددی میباشد.

یکی از اثرات مهم ساختار اکسیدکننده و گونه رقیق کننده جهت کاهش غلظت اکسیژن در ناحیه واکنشی بهمنظور ایجاد احتراق بدون شعله بر روی میزان آلاینده ناکس^۳ تولید شده میباشد. مطالعه عددی رفتار انتشار آلاینده ناکس در احتراق سوخت-اکسیژن همراه با بازچرخش دیاکسید کربن و بررسی اثرات فیزیکی و شیمیایی ناشی از این بازچرخش توسط پارک و همکاران [۱۲]

انجام پذیرفت. نتایج بدست آمده از این بررسی نشان میدهد که بازچرخش دیاکسید کربن و تزریق آن درون اکسیدکننده با توجه به کاهش دمای بیشینه فرآیند احتراق منجر به کاسته شدن میزان آلاینده ناکس به صورت قابل توجهی میشود. مطالعه دیگر انجام شده توسط گاسکوین و همکاران [۱۳] میباشد؛ این مطالعه بر روی اثرات حرارتی تزریق دیاکسید کربن بر میزان آلاینده ناکس منتشر شده با استفاده از حلگر شعله غیر پیش آمیخته جریان متقابل صورت گرفته است. شبیهسازیهای صورت گرفته نشان میدهند که تزریق دیاکسید کربن منجر به کاهش دما و در نتیجه ناکس حرارتی می گردد. علاوهبراین تغییرات نرخ کرنش با وجود تاثیر کم بر روی دما، میتواند اثر قابل توجهی بر روی میزان ناکس منتشر شده گذاشته و با افزایش نرخ کرنش، میزان آلاینده ناکس نیز به صورت قابل توجهی افزایش مییابد.

یکی از چالش هایی که پیرامون تغییر سیستم های احتراقی سنتی سوخت-هوا به سیستم های احتراقی سوخت-اکسیژن وجود دارد، دمای بالای شعله در فرآیند احتراقی سوخت-اکسیژن می باشد. یکی از روش هایی که در این زمینه در سال های اخیر مورد توجه قرار گرفته است تا بدون تغییر سیستم احتراقی و مشعل های آن بتوان به شرایط احتراقی مشابهی دست پیدا کرد، بازچرخش دی اکسید کربن و بخارآب درون اکسید کننده می باشد. سونگ و همکاران [۱۴] به مطالعه عددی مکانیزم شیمیایی تاثیر دی اکسید کربن بر روی توزیع دما در احتراق متان-اکسیژن پرداختند. در این مطالعه بررسی های لازم جهت جایگزینی سیستم های احتراقی متان-هوای موجود با سیستم های متان- O_2/CO_2 مورد بررسی قرار گرفت. نتایج بدست آمده نشان می دهند که در محیط O_2/CO_2 نیاز به غلظت اکسیژنی حدود ده درصد بیشتر از احتراق سوخت- هوا می باشد تا بتوان به

مطالعاتی که تاکنون بر روی اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن صورت گرفته بیشتر بر روی احتراق سوخت-اکسیژن متمرکز بوده و به کمک حلگر شعله غیر پیشآمیخته که در آن جریان آرام در نظر گرفته میشود، انجام شده است. علاوه بر این، در بررسیهای انجام شده تاثیر اثرات فیزیکی و شیمیایی بر روی ساختار شعله بوده و بحث بر روی آلایندهها مورد توجه قرار نگرفته است. در مطالعه حاضر با استفاده از مشعل جی.اچ.سی

¹ Counter Flow Diffusion Flame

² Jet Hot Coflow (JHC)

 $³ NO_x$





و شبیه سازی متقارن محوری آن به بررسی اثرات فیزیکی (ظرفیت گرمایی ویژه، خواص تشعشعی، جرم مولکولی، چگالی و ضرایب نفوذ مولکولی متفاوت دی اکسید کربن در مقایسه با نیتروژن) و شیمیایی (حضور فعال دی اکسید کربن در واکنش های شیمیایی در مقایسه با نیتروژن) ناشی از تزریق دی اکسید کربن بر ساختار شعله و تولید آلاینده ها در احتراق متان/هیدروژن-هوا پرداخته شده است که تا کنون در مطالعات دیگر مورد بررسی قرار نگرفته است. علاوه بر این اثر تغییرات دمای پیش گرمایش اکسیدکننده نیز بر روی اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دی اکسید کربن نیز مورد بحث و بررسی قرار گرفته است.

۲- شرایط حل عددی

1-۲- هندسه و محدوده حل عددی

به منظور انجام شبیه سازی عددی مورد نظر از هندسه و مشعل احتراقی بدون شعله ساخته شده توسط دالی و همکارانش [۱۵ و ۱۶] استفاده شده است. مطابق با شکل ۱ از محدوده حل متقارن محوری با توجه به هندسه و فیزیک متقارن حاکم بر مسئله استفاده شده است؛ سوخت از ناحیه مرکزی و لولهای به قطر ۴/۲۵ میلی متر وارد مشعل می شود. به منظور دستیابی به احتراق بدون شعله از جریان محصولات داغ احتراقی با قطر خارجی ۷۷/۷۵ میلی متر استفاده شده است. همچنین در بررسی تجربی مشعل درون تونل بادی قرار داده شده است که به منظور برقراری اعمال شرایط مرزی مناسب، ورودی هوای تونل باد بر اساس سایر مطالعات صورت گرفته ناحیه ای به قطر

خارجی ۲۱۰ میلیمتر در نظر گرفته شده است. طول محدوده حل عددی نیز برابر با ۵۲۰ میلیمتر در نظر گرفته شده است که این فاصله امکان اعمال شرایط مناسب و فیزیکی را فراهم می آورد.

۲-۲- شرایط مرزی حاکم بر مسئله

شرایط مرزی حاکم بر مسئله با توجه به مرزهای بیان شده در شکل ۱ مطابق با جدول ۱ میباشد. در این جدول ردیفهای اول تا سوم مربوط به شرایط حاکم بر حل تجربی میباشند که به منظور اعتبارسنجی حلگر مورد استفاده در شبیه سازی عددی مورد استفاده قرار می گیرند. ردیفهای 4 تا 7X شرایط مرزی حاکم به منظور بررسی تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق مقادیر مختلفی از دی اکسید کربن را شامل گردیده و ردیفهای 8 تا XT از نیز شامل بررسی اثر دمای پیش گرمایش اکسیدکننده بر تاثیر فیزیکی و شیمیایی ناشی از تزریق ۵۰ درصد کسر جرمی دی اکسید کربن درون اکسیدکننده را شامل می شود.

۲-۳- روش حل عددی

از نرمافزار متن باز اپنفوم بهمنظور انجام شبیه سازی های عددی استفاده شده است که در آن معادلات متوسط گیری شده ناویر استوکس در شرایط آشفته حل می گردند. جهت مدل سازی آشفتگی از مدل کا-اپسیلون استاندار همراه با اصلاح ضریب C_{e_1} از ۱/۴۴ به

جدول ۱: شرایط مرزی دمایی و کسر جرمی گونهها مختلف سمت اکسیدکننده در شرایط مختلف شبیهسازی

Tabel 1: Thermal boundary conditions and different species mass fraction on the oxidizer side in different conditions simulation

	کسر جرمی گونههای محصولات احتراق (درصد	دمای محصولات		
کسر جرمی هوای تونل باد (درصد جرمی)	جرمی)	احتراق (K)	رديف	
۔ شرایط مرزی حاکم بر مسئله جهت اعتبار سنجی حلگر و شایط حل عددی انتخاب شدہ (برای سه کسر جرمی اکسیژن متفاوت ۳، ۶ و ۹				
	۔ درصد)			
$O_2=$ TT , $CO_2=\cdot$, $H_2O=\cdot$,	$O_2=\mathfrak{V}$, $CO_2=\Delta/\Delta$, $H_2O=\mathfrak{S}/\Delta$, $N_2=\lambda\Delta$,	1		
$N_2 = vv$, $XCO_2 = \cdot$	XCO ₂ =0	11 • •	١	
$O_2=$ TT , $CO_2=\cdot$, $H_2O=\cdot$,	$O_2{=}F$, $CO_2{=}\texttt{a/a}$, $H_2O{=}F/a$, $N_2{=}AY$,		٢	
$N_2=vv$, $XCO_2=$ •	$XCO_2=$.	11 • •		
$O_2=$ rr , $CO_2=\cdot$, $H_2O=\cdot$,	$O_2 \!\!=\!\! \mathfrak{q}$, $CO_2 \!\!=\!\! \Delta / \Delta$, $H_2 O \!\!=\!\! \textbf{F} / \Delta$, $N_2 \!\!=\!\! \textbf{Y} \textbf{q}$,	1	٣	
N₂=ŸŸ ,XCO₂=∙	$XCO_2 = \cdot$	11		
ط استفاده از نیتروژن خالص به همراه ۳ درصد کسر	لقادیر مختلف دیاکسید کربن (ردیف ۴ مربوط به شرای	یزیکی و شیمیایی تزریق ه	تاثير ف	
مایگزینی ۲۵، ۵۰ و ۷۵ درصد از نیتروژن با CO2 می	میباشد. ردیف های ۵، ۶ و ۷ نیز به ترتیب مربوط به ح	O در سمت اکسیدکننده	جرمی 2	
با گونه مجازی X در سمت اکسیدکننده می باشد.)	7 نیز مربوط به جایگزینی ۲۵، ۵۰ و ۲۵ درصد از N2	. ردیف های 5X، S X و X	باشد.	
$O_2=TT$, $CO_2=\cdot$, $H_2O=\cdot$,	$O_2=v$, $CO_2=\cdot$, $H_2O=\cdot$, $N_2=v$,	۱۳	*	
$N_2 = YY, XCO_2 = \cdot$	XCO₂=∙	11		
$O_2=$ të , $CO_2=$ ta , $H_2O=$ · ,	$O_2 = \ensuremath{\texttt{r}}$, $CO_2 = \ensuremath{\texttt{r}} \Delta$, $H_2O = \ensuremath{\boldsymbol{\cdot}}$, $N_2 = \ensuremath{\texttt{r}} \ensuremath{\texttt{r}}$,	۱۳	~	
N ₂ =δγ ,XCO ₂ =•	$XCO_2 = \cdot$	11.	3	
$O_2=$ r $, O_2=\cdot, H_2O=\cdot,$	$O_2= \ensuremath{\mathfrak{r}}$, $CO_2= \ensuremath{\cdot}$, $H_2O= \ensuremath{\cdot}$, $N_2= \ensuremath{vr}$,	1500	۵X	
Ν2=ΔΥ ,ΧCO2=ΥΔ	XCO ₂ =۲۵	11		
$O_2=$ TT, $CO_2=$ a·, $H_2O=$ ·,	$O_2=\mathfrak{r}$, $CO_2=\mathfrak{d}\cdot$, $H_2O=\cdot$,	۱۳۰۰	ç	
N₂=۲۷ ,XCO₂=∙	N ₂ =۴۷ ,XCO ₂ =•	11.	/	
$O_2=$ rr , $CO_2=\cdot$, $H_2O=\cdot$,	$O_2=r$, $CO_2=\cdot$, $H_2O=\cdot$,	1500	۶X	
N ₂ =τν ,XCO ₂ =Δ·	N ₂ =۴γ ,XCO ₂ =۵·	11		
$O_2=YY$, $CO_2=Y\Delta$, $H_2O=\cdot$,	$O_2=r$, $CO_2=r\Delta$, $H_2O=\cdot$,	15	v	
$N_2=r$, $XCO_2=$.	N ₂ =17,XCO ₂ =.	11	Ŷ	
$O_2=$ rr , $CO_2=\cdot$, $H_2O=\cdot$,	$O_2=r$, $CO_2=\cdot$, $H_2O=\cdot$,	1	vV	
N2=γ ,XCO2=γ۵	N2=γχ ,XCO2=γα	11 * *	۲A	
ن اکسیدکننده (ردیف ۸ مربوط به شرایط استفاده از	۰ بر اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق CO ₂ در جریان	ادیر پیشگرمایش مختلف	تاثير مقا	
ِدیفهای ۹ و ۹XT نیز به ترتیب مربوط به شرایط	کننده با دمای پیش گرمایش ۱۱۰۰ کلوین میباشد. ر	خالص در سمت اکسیدآ	نيتروژن	
، ردیف بعد شرایطی کاملا مشابه با سه ردیف توضیح	نیتروژن با CO ₂ در جریان اکسیدکننده میباشد. سه	ی ۵۰ درصد کسر جرمی	جايگزيني	
۱۵۰۰ کلوین است)	داده شده داشته و تنها دمای پیش گرمایش در آنها	>		
$O_2=$ TT , $CO_2=$ a· , $H_2O=$ · ,	$O_2 = \mathfrak{r}$, $CO_2 = \cdot$, $H_2O = \cdot$,		٨	
N2=YY,XCO2=•	N ₂ =۹۷ ,XCO ₂ =•	11.	^	
$O_2=$ YT, $CO_2=$ $\delta \cdot$, $H_2O=$ \cdot ,	$O_2=\mathfrak{r}$, $CO_2=\mathfrak{d}\cdot$, $H_2O=\cdot$,		٩	
N ₂ =ry ,XCO ₂ =•	N ₂ =۴۷ ,XCO ₂ =•	,,,,,	``	
$O_2=$ TT , $CO_2=$ · , $H_2O=$ · ,	$O_2=r$, $CO_2=\cdot$, $H_2O=\cdot$,		٩XT	
N ₂ =۲ ,XCO ₂ =۵۰	N ₂ =۴γ ,XCO ₂ =۵·	11		
$O_2=$ TT, $CO_2=$ a·, $H_2O=$ ·,	$O_2=$ ^{ψ} , $CO_2=$ ·, $H_2O=$ ·,	10	1.	
N ₂ =ry ,XCO ₂ =•	N ₂ =۹۷ ,XCO ₂ =•	1000	1.	
$O_2=$ YT, $CO_2=$ $\delta \cdot$, $H_2O=$ \cdot ,	$O_2=r$, $CO_2=a\cdot$, $H_2O=\cdot$,	10 11		
N2=rv,XCO2=•	N2=40 ,XCO2=•			
$O_2=$ rr , $CO_2=\cdot$, $H_2O=\cdot$,	$O_2=$ ^w , $CO_2=$ ·, $H_2O=$ ·,	14	1 YT	
N ₂ =۲ ,XCO ₂ =۵۰	N ₂ =۴γ ,XCO ₂ =۵·	10++ 11.		

۱/۶ استفاده شده است. این کار به علت خطای بالای مدل آشفتگی کا-اپسیلون استاندارد در پیش بینی جتهای دایروی و بر اساس شبیه سازی های عددی صورت گرفته در مراجع [۱۷ و ۱۸] انجام شده است. علاوه براین جهت مدل سازی بر هم کنش آشفتگی و شیمی واکنش ها از مدل احتراقی پی.آ.اس.آر موجود در حلگر ریاکتینگ فوم^۲ استفاده شده است.

یکی از موضوعاتی که در شبیهسازی عددی جریانهای واکنشی از اهمیت بالایی برخوردار است، مدلسازی تشعشع گازهای حاصل از فرآیند احتراق میباشد. بررسیها انجام شده بر روی مشعل بدون شعله مورد مطالعه نشان میدهد که در شبیهسازی آن میتوان از مدلسازی تشعشع صرفنظر کرد. با توجه به اینکه در مطالعه حاضر از طرفی اثر تزریق دیاکسید کربن بهصورت فیزیکی و شیمیایی مورد بررسی قرار گرفته و تشعشع یکی از خواص فیزیکی مهم به شمار میآید و از طرف دیگر خواص دیاکسید کربن کاملا با نیتروژن تفاوت دارد، از مدل تعشعشی فاز گسسته جهت انجام شبیهسازیها استفاده شده است. در محاسبه ضرایب جذب و گسیل از مدل متوسط گیری شده گازهای فیرخاکستری با شش پهنای باند بهصورت جدول ۲ مطابق با مطالعه صورت گرفته توسط کامبر و همکاران [۱۹] استفاده شده است. و گونههای احتراقی به خصوص آلاینده ناکس استفاده شده است. از سینیتیک شیمیایی SII 2.11 با توجه به پیشبینی بهتر توزیع دما

الگوریتم پیمپل^۳ به منظور بر طرف کردن کوپلینگ میان سرعت و فشار مورد استفاده قرار گرفته است. به منظور گسسته سازی ترمهای جابه جایی از روش کوئیک^۴ استفاده شده است. معیار پایایی و همگرایی حل نیز در نظر گرفتن باقی مانده کلیه ترمها برابر با ۲۰۰۷ و همچنین عدم تغییرات دما و سرعت در خروجی یه میزان کمتر از ۱ کلوین و ۱/۰ متر بر ثانیه پس از یک دهم ثانیه می باشد.

۳- روش بررسی تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن

تفاوتهای فیزیکی دیاکسید کربن با نیتروژن شامل تفاوت در ظرفیت گرمایی ویژه، خواص تشعشعی و نفوذ مولکولی میشود.

- 1 Partially Stirred Reactor (PaSR)
- 2 ReactingFOAM
- 3 PIMPLE
- 4 QUICK

جدول ۲ ضرایب مربوط به شرایط تشعشعی گاز غیرخاکستری Table 2: The coefficients for non-gray gas radiation conditions

ميزان	طول موج (ميكرومتر µm)					
تزريق	•/•_	۲/۵-	۳/۰ –	۴/۰-	۵/۰-	٩/٠-
CO ₂	۲/۵	٣/٠	۴/۰	۵/۰	٩/٠	۲۰
۲۵	•	•/Y۵	•	• /YA	•	۰/۷۲
۵۰	•	٠/٧٩	•	۰/۸۲	•	٠/٧۵
۷۵	•	٠/٨٢	•	٠/٨۵	•	• /YA

از طرفی تفاوت شیمیایی این دو گونه نیز مربوط به حضور آنها در واکنشهای شیمیایی میباشد. حضور دیاکسید کربن در واکنشهای تجزیهای که منجر به تولید مونواکسید کربن و همچنین جذب گرما از فرآیند احتراق میشود، تاثیر بهسزایی روی پیشبینی صحیح توزیع دما و همچنین توزیع آلایندههای ناکس و کربن مونوکسید خواهد داشت. در واقع منظور از تاثیر فیزیکی تفاوت میان ظرفیت گرمایی ویژه، خواص تشعشعی، چگالی، جرم مولکولی و محاسبه ضریب نفوذ مولکولی بین نیتروژن و گونه مجازی X میباشد. منظور از تاثیر شیمیایی ترریق دیاکسید کربن نیز تفاوت ناشی از حضور دیاکسید کربن در واکنشهای شیمیایی با گونه مجازی X است که در واکنشهای

در این مطالعه به منظور مشاهده تاثیر فیزیکی و شیمیایی جایگزینی دی اکسید کربن با نیتروژن از گونه مجازی X استفاده شده است. این گونه خواص فیزیکی (ظرفیت حرارتی، خواص تشعشعی، خواص نفوذی، چگالی، جرم مولکولی و ...) کاملا مشابهی با دی اکسید کربن داشته اما در واکنشهای شیمیایی شرکت نمی کند. این کار با افزودن این گونه به سینتیک GRI2.11 انجام شده است به نحوی که زنجیره واکنشها دستخوش تغییر نشده و این گونه در هیچ یک از واکنشها شرکت ندارد. مقایسه حالت تزریق گونه مجازی X با حالت تزریق نیتروژن خالص بیانگر تاثیر فیزیکی ناشی از جایگزینی دی اکسید کربن با نیتروژن می باشد، در حالی که مقایسه میان نتایج بدست آمده از تزریق دی اکسید کربن با گونه مجازی X بیانگر تاثیر شیمیایی این تزریق است.

۴- نتایج

۴-۱- استقلال از شبکه و اعتبارسنجی حلگر مورد استفاده بهمنظور انجام شبیهسازی عددی از شبکه کاملا ساختار یافته



شکل ۲: استقلال نتایج از شبکه عددی ایجاد شده الف) توزیع دما روی خط مرکزی مشعل، ب) توزیع کربن مونوکسید روی خط مرکزی مشعل Fig. 2: Independent results from created numerical grid a) temperature distribution on the burner centerline, b) Carbon monoxide distribution on the burner centerline

۴-۲-۲ تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن بر ساختار شعله

از مهمترین اثرات ناشی از جایگزینی دیاکسید کربن با نیتروژن در جریان اکسیدکننده تغییر ساختار شعله تشکیل شده میباشد. یکی از مهمترین گونهها در فرآیندهای احتراقی که نقش اساسی در واکنشهای شیمیایی و همچنین آزادسازی حرارت ایفا میکند، توزیع رادیکال هیدروکسیل (OH) میباشد. از اینرو در در شکل ۴ نتایج تغییرات شعاعی غلظت این رادیکال برای مقادیر تزریق ۲۵، ۵۰ و ۷۵ درصد جرمی دیاکسید کربن و همچنین گونه مجازی X برای بررسیهای انجام گرفته مطابق با جدول ۱ نشان داده شده است.

مطابق با شکل ۴، تاثیر فیزیکی تزریق دی کسید کربن به گونهای است که منجر به کاهش قابل توجهی در مقدار بیشینه غلظت رادیکال هیدروکسیل می گردد که این کاهش با افزایش تزریق دی اکسید کربن، افزایش می یابد. کاهش میزان OH تولید شده در این شرایط به علت جذب حرارت بیشتر در شرایط تزریق دی اکسید کربن با توجه به ظرفیت حرارتی بالاتر آن نسبت به نیتروژن می باشد؛ این موضوع سبب می شود تا نرخ واکنش OL+H H+H مهمترین واکنش در تولید OH است، کاهش پیدا کند. از طرفی مهمترین واکنش در تولید OH است، کاهش پیدا کند. از طرفی در خروجی این اثر به علت آزادسازی حرارت بیشتر جذب شده (در می می وزن شایت به نیتروژن) منجر به افزایش غلظت این رادیکال می شود. با توجه به این نتایج می توان گفت که تاثیر فیزیکی تزریق دی اکسید کربن منجر به توزیع

غیریکنواخت استفاده شده است. به منظور بررسی استقلال نتایج بدست آمده از شبکه محاسباتی از چهار شبکه ۱۶۰۰۰، ۴۲۵۵۰، ۹۶۸۰۰ و ۱۶۱۳۰۰ سلولی استفاده شده است. شکل ۲ نمودار تغییرات دما و کربن مونوکسید را بر روی محور مرکزی مشعل بدون شعله مورد بررسی نشان میدهد. همان گونه که مشاهده می شود، نتایج حاصل از شبکه ۴۲۵۵۰ سلولی انطباق بسیار خوبی با دادههای بدست آمده از شبکههای ۹۶۸۰۰ و ۱۶۱۳۰۰ سلولی دارند. از اینرو شبکه ۴۲۵۵۰ سلولی به عنوان شبکهای که در آن نتایج بدست آمده مستقل از شبکه محاسباتی هستند، جهت انجام شبیهسازیها مورد استفاده قرار گرفته است. در شکل ۳ نتایج مربوط به اعتبار سنجى حلگر مورد استفاده جهت انجام شبيه سازى ها آورده شده است. نتایج مربوط به توزیع دما و کسر جرمی گونههای مونوکسید کربن و بخارآب در این شکل مشاهده می شود. در جدول ۳ خطای متوسط مربوط به هر یک از این متغیرها در سه غلظت اکسیژن ۳، ۶ و ۹ درصدی در جریان اکسیدکننده آورده شده است که مطابق با این جدول نتایج بدست آمده تطابق خوبی با دادههای تجربی دارند.

۴-۲-تاثیر تزریق مقادیر مختلف دی اکسید کربن در جریان اکسید کننده درابتدا به بررسی تاثیر فیزیکی و شیمیایی مقادیر مختلف تزریق بر روی ساختار شعله و انتشار آلایندههای مونواکسید کربن و ناکس پرداخته می شود.



شکل ۳: مقایسه نتایج حاصل از شبیهسازی عددی با دادههای تجربی در مقطع عرضی به فاصله ۳۰ سانتیمتری از ابتدای مشعل، الف) دما، ب) کسر جرمی مونوکسید کربن، ج) کسر جرمی بخار آب

Fig. 3: Comparison bettween experimental data with the obtaned results from numerical simulation in the cross section of 30 cm from burner inlet, a) temperature, b) carbon monoxide mass fraction, c) water vapor mass fraction

جدول ۳: خطای متوسط دما، دی اکسید کربن و بخار آب در فاصله ۳۰ سانتیمتری از ورودی های مشعل Table 3: Average errr of temperature, carbo dioxide and water vapor in the 30 cm from burner inlets

متغير	درصد خطای متوسط		
	۳% О2	۶% O2	۹% O2
دما	٩	١٢	11
کسر جرمی CO	11	14	٩
کسر جرمی H ₂ O	۱۵	١٨	14



شکل ۴ : اثر فیزیکی و شیمیایی تزریق دی اکسید کربن بر غلظت رادیکال هیدروکسیل در فاصله ۹۰ سانتیمتری از ابتدای مشعل Fig. 4: Chemical and physical effect of CO2 injection on the OH mass fraction in 90cm from burner inlets

یکنواختتر رادیکال هیدروکسیل گردیده که این موضوع بیانگر توزیع حرارت یکنواختتر ایجاد شده نیز میباشد.

تاثیر شیمیایی تزریق دیاکسید کربن به گونهای است که منجر به افزایش کسر جرمی رادیکال هیدروکسیل از طریق واکنش H+O₂↔O+OH می گردد. در واقع شرکت دیاکسید کربن در واکنشهای شیمیایی منجر به آزاد شدن رادیکال H بیشتری گردیده و این موضوع سبب می شود تا واکنش بیان شده به منظور تولید رادیکال هیدروکسیل با نرخ بیشتری انجام گردد.

میزان افزایش بیشینه رادیکال هیدروکسیل با افزایش میزان تزریق دیاکسید کربن کاهش مییابد. مطابق با نتایج بدست آمده برای واکنشهای مختلف، این موضوع به علت کاهش تاثیر شرکت دیاکسید کربن در مقادیر تزریق بالای آن به علت کاهش دمای فرآیند احتراق و در نتیجه تاثیر کمتر آن بر نرخ واکنشهای بیان شده میباشد. مجموع اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن نیز نشان دهنده کاهش میزان رادیکال هیدروکسیل میباشد. این موضوع

منجر به کاهش میزان درخشش شعله در شرایط تزریق دیاکسید کربن نسبت به اکسیژن میباشد که این موضوع با نتایج بدست آمده از مرجع [۸] مطابقت دارد.



شکل ۵ : اثر فیزیکی و شیمیایی تزریق دی اکسید کربن بر کسر جرمی فرمالدهید در فاصله ۹۰ سانتیمتری از ابتدای مشعل Fig. 5: Chemical and physical effect of CO2 injection on the CH2O mass fraction in 90cm from burner inlets

با قسمتهای ب و د شکل ۶ می توان مشاهده کرد که تاثیر شیمیایی ناشی از تزریق دی اکسید کربن نیز به گونه ای است که منجر به کاهش دما در ناحیه واکنشی می شود. این موضوع به علت گرماگیر بودن واکنش هایی است که دی اکسید کربن در آن ها حضور داشته و این موضوع منطبق با داده های بدست آمده در مرجع [۷] می باشد.

۴-۲-۲- تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن بر آلاینده مونواکسید کربن و ناکس

اثر دیگر مهم ناشی از جایگزینی دیاکسید کربن با نیتروژن در جریان اکسیدکننده بر روی توزیع آلایندهها میباشد. در شکل ۷ اثرات فیزیکی و شیمایی ناشی از تزریق دیاکسید کربن بر توزیع مونوکسید کربن نشان داده شده است. همان گونه که مشاهده میشود اثرات فیزیکی و شیمیایی ناشی از جایگزینی دیاکسید کربن با نیتروژن بر تشکیل مونوکسید کربن کاملا متفاوت با یکدیگر میباشد. تاثیر فیزیکی ناشی از تزریق دیاکسید کربن منجر به کاهش میزان مونوکسیدکربن تولیدی میشود. این موضوع به علت بیشتر بودن ظرفیت حرارتی دیاکسید کربن نسبت به نیتروژن بوده که منجر به جذب حرارت بیشتر از فرآیند احتراق گردیده و در نتیجه منجر به کاهش نرخ واکنشهای تجزیه دیاکسید کربن به مونواکسیدکربن میشود. از طرفی تاثیر شیمیایی مونوگسید تولید شده میگردد. این افزایش از طریق فعال تر شدن واکنش

شکل ۶ تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن بر توزیع دما را نشان میدهد. در شکل ۶ الف و ب نتایج مربوط به تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق ۲۵ درصدی دیاکسید کربن به ترتیب نمایش داده شده است (در شکل ۶ الف تصویر بالا مربوط به شرایط استفاده از نیتروژن خالص می باشد (حالت ۴ جدول ۱) و شکل پایین مربوط به تزریق ۲۵ درصد گونه مجازی X (حالت 5X جدول ۱) است. در شکل ۶ ب نیز تصویر بالا مربوط به تزریق ۲۵ درصد گونه مجازی X (حالت جدول ۱) و تصویر پایین مربوط به تزریق ۲۵ درصد دی کسید5Xکربن (حالت ۵ جدول ۱) است). در شکل ۶ ج و د نیز نتایج مربوط به تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق ۷۵ درصدی دیاکسید کربن به ترتیب نمایش داده شده است (در شکل ۶ ج تصویر بالا مربوط به شرایط استفاده از نیتروژن خالص می باشد (حالت ۴ جدول ۱) و شکل پایین مربوط به تزریق ۷۵ درصد گونه مجازی X (حالت 7 Xجدول ۱) است. در شکل ۶ د نیز تصویر بالا مربوط به تزریق ۷۵ درصدی کونه X (حالت Xجدول ۱) و تصویر پایین مربوط به تزریق ۷۵ Xدرصد دی کسید کربن (حالت ۲ جدول ۱) است). با توجه به نتایج بدست آمده میتوان مشاهده کرد که تاثیر فیزیکی تزریق دیاکسید کربن بر توزیع دما به گونهای است که منجر به کاهش دما میشود که این موضوع به علت ظرفیت حرارتی بالاتر دی کسید کربن در مقایسه با نیتروژن میباشد. این تاثیر با افزایش میزان تزریق دیاکسید کربن مطابق با نتایج بدست آمده افزایش پیدا کرده است. همچنین مطابق









شکل ۶: تاثیر فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن بر توزیع دما الف) تزریق ۲۵ درصد گونه مجازی X (تاثیر فیزیکی تزریق)، ب) تزریق ۲۵ درصدی دیاکسید کربن (تاثیر شیمیایی تزریق)، ج) تزریق ۷۵ درصد گونه مجازی X (تاثیر فیزیکی تزریق)، د) تزریق ۷۵ درصدی دیاکسید کربن (تاثیر شیمیایی تزریق)

Fig. 6: Chemical and physical effect of CO2 injection on the temperature distribustion a) 25% injection of X virtual species (physical effect of injection), b) 25% injection of CO2 species (chemical effect of injection), c) 75% injection of X



شکل ۷ : اثر فیزیکی و شیمیایی تزریق دی اکسید کربن بر کسر جرمی کربن مونوکسید در فاصله ۹۰ سانتیمتری از ابتدای مشعل Fig. 7: Chemical and physical effect of CO2 injection on the CO mass fraction in 90cm from burner inlet

همچنین کاهش میزان نیتروژن در دسترس برای تولید آلاینده ناکس می شود؛ در حالی که رفتار شمیایی منجر به افزایش قابل توجه میزان ناکس تولیدی می شود. این موضوع به علت میزان کربن دی اکسید بیشتر در دسترس براي توليد ناكس از طريق واكنش N₂+CO₂↔NO+NCO $HNCO+OH \leftrightarrow NH_2+CO_2$ و همچنين افزايش نرخ واکنش که منجر به افزایش تولید HNCO گردیده و از طریق واکنش HNCO+H↔NO+CH, ميزان ناکس توليدي را افزايش ميدهد. علاوهبراین با افزایش میزان تزریق مقدار دیاکسید کربن در دسترس جهت انجام واکنشهای ذکر شده نیز افزایش می ابد. در مقادیر کسر جرمی بالای تزریق دی کسید کربن درون اکسیدکننده (کسر جرمی ۷۵ درصدی دیاکسید کربن) علاوهبر کاهش دما، کاهش نیتروژن در دسترس نیز به صورت قابل توجهی بر روی میزان ناکس منتشر شده تاثیر گذار خواهد بود. همچنین در این کسر جرمی از تاثیر شیمیایی تزریق با توجه به كاهش نرخ واكنش N₂+CO₂↔NO+NCO به صورت قابل توجهی کاسته می شود. با توجه به نتایج حاصل شده می توان مشاهده کرد که تزریق دی کسید کربن در مقادیر بالا منجر به کاهش ناکس و در مقادیر پایین منجر به افزایش ناکس می شود.

۴-۳- تاثیر میزان دمای پیش گرمایش بر تزریق دیاکسید کربن در جریان اکسیدکننده

یکی از پارامترهای اصلی در دستیابی به احتراق بدون شعله رسیدن دمای مخلوط احتراقی به دمای خوداشتعالی سوخت شیمیایی CO₂+M↔CO+O+M است. در شرایط تزریق دیاکسید کربن به علت دیاکسید کربن موجود بیشتر در مخلوط احتراقی، این واکنش فعالتر شده و منجر به تولید مونوکسید کربن بیشتر می گردد.

شکل ۸ مقایسه اثرات شیمیایی و فیزیکی برای دو حالت تزریق ۲۵ و ۷۵ درصد کسر جرمی دیاکسید کربن درون اکسیدکننده بر روی میزان مونواکسید کربن تولیدی را نشان میدهد. همانطور که در این کانتورها مشاهده میشود با افزایش میزان تزریق دیاکسید کربن ، میزان کربن مونوکسید تولید شده بر اثر تاثیر شیمیایی ناشی از تزریق دیاکسید کربن به صورت قابل توجهی افزایش می یابد (مقدار بیشینه کربن مونوکسید تولید شده در این شرایط از ۰۸۰ در حالت تزریق ۵۰ درصد کیسر جرمی دیاکسید کربن افزایش می یابد).

آلاینده دیگری که در فرآیندهای احتراقی بسیار مورد توجه قرار می گیرد، ناکس است. در شکل ۹ تاثیرات شیمیایی و فیزیکی ناشی از تزریق دی اکسید کربن درون اکسید کننده بر روی میزان آلاینده ناکس در فاصله ۹۰ سانتی متری از ورودی سوخت و اکسید کننده نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود، تزریق مقادیر بالای دی اکسید کربن درون اکسید کننده به صورت فیزیکی و شیمیایی منجر به کاهش کسر جرمی ناکس می شود. این در حالی است که تزریق دی اکسید کربن معادل مدون ناکس می شود. این در حالی است که تزریق دی اکسید کربن معادل از خود نشان می دهد. در این حالت تاثیر فیزیکی تزریق منجر به کاهش میزان ناکس تولید شده به علت کاهش بیشینه دمای فرآیند احتراق و



0.005 0.01 0.015 0.02 0.025 0.03 0.035 0.04 0.045 0.05 (الف)



شکل ۸: مقایسه اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق مقادیر مختلف دیاکسید کربن درون اکسیدکننده بر روی انتشار مونوکسید کربن الف) تزریق ۲۵ درصدی دیاکسید کربن ، ب) تزریق ۲۵ درصدی دیاکسید کربن ، ب)

Fig .8: comparison btween physical and chemical effects of different values of CO2 injection on the CO emission a) 25% injection of CO2, b) 75% injection of CO2



شکل ۹: اثر فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن بر کسر جرمی ناکس در فاصله ۹۰ سانتیمتری از ابتدای مشعل Fig. 9: Chemical and physical effect of CO2 injection on the NOx mass fraction in 90cm from burner inlet

احتراقی مطالعات گستردهای صورت گرفته است تا بتوان با استفاده از بازچرخش محصولات احتراقی درون محفظه احتراق، بخشی از پیش گرمایش را تامین کرده و بدین ترتیب جهت

میباشد. در سالهای اخیر بهمنظور افزایش کاربردهای این رژیم احتراقی در فرآیندهای احتراق صنعتی مختلف بر روی میزان پیش گرمایش اکسیدکننده ورودی با استفاده از محصولات داغ



شکل ۱۰: اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن درون اکسیدکننده بر کسر جرمی رادیکال هیدروکسیل تشکیل شده در فاصله ۹۰ سانتی متری مشعل برای دماهای پیشگرمایش مختلف، الف) مقایسه دمای ۱۱۰۰ و ۱۳۰۰ کلوین، ب) مقایسه دمای ۱۳۰۰ و ۱۵۰۰ کلوین

Fig. 10: Chemical and physical effects of CO2 injection into oxidizer on the OH mass fraction in 90cm from burner inlet for different preheating temperature, a) camparison between 1100 K and 1300 K, b) camparison between 1300 K and 1500 K

به بررسی تاثیر میزان دمای پیش گرمایش اکسیدکننده روی اثرات فیزیکی و شیمیایی ناشی از تزریق دیاکسید کربن درون اکسیدکننده پرداخته شده است. در شکل ۱۰ تغییرات غلظت رادیکال هیدروکسیل در فاصله ۹۰ سانتی متری از ورودی مشعل برای دو دمای ۱۱۰۰ و ۱۵۰۰ کلوین با شرایط دمای ورودی ۱۳۰۰ کلوین در شرایط تزریق ۵۰ درصد جرمی اکسید کننده برابر با دیاکسید کربن و گونه مجازی X نشان داده است. میزان کسر جرمی رادیکال هیدروکسیل با افزایش دمای پیش گرمایش افزایش مییابد. افزایش دما منجر به تجزیه بیشتر H_2O از طریق واکنش $O_2H+H \leftrightarrow_2O+H+O$ گردیده که این موضوع سبب افزایش میزان رادیکال هیدروکسیل تولیدی میشود. نتایج بدست آمده نشاندهنده آن است که با افزایش دمای پیش گرمایش از ۱۳۰۰ کلوین به ۱۵۰۰ کلوین میزان بیشینه تاثیر فیزیکی تزریق دیاکسید کربن از ۶۸ درصد کاهش غلظت این رادیکال دستیابی به احتراق بدون شعله دمای اکسیدکننده پایینتری لازم باشد. از طرفی در کاربردهای دما بالا نیز لازم است تا مقادیر پیش گرمایش به صورت قابل توجهی بالا باشد تا بتوان به متوسط دمایی مورد نظر با استفاده از احتراق بدون شعله دست پیدا کرد. از اینرو یکی از پارامترهای اساسی که در احتراق بدون شعله بررسی میشود میزان دمای پیش گرمایش است. این دما میتواند بر روی اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دی اکسید کربن درون اکسیدکننده نیز اثر گذار باشد که در مطالعه حاضر مورد بررسی قرار گرفته است.

۴-۳-۱ - تاثیر میزان دمای پیش گرمایش اکسیدکننده بر اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دی اکسید کربن روی ساختار شعله

با استفاده از سه دمای پیش گرمایش ۱۱۰۰، ۱۳۰۰ و ۱۵۰۰ کلوین



شکل ۱۱: اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن درون اکسیدکننده بر کسر جرمی رادیکال فرمالدهید تشکیل شده در فاصله ۹۰ سانتی متری مشعل برای دماهای پیش گرمایش مختلف، الف) مقایسه دمای ۱۱۰۰ و ۱۳۰۰ کلوین، ب) مقایسه دمای ۱۳۰۰ و ۱۵۰۰ کلوین

Fig. 11: Chemical and physical effects of CO2 injection into oxidizer on the CH2O mass fraction in 90cm from burner inlet for different preheating temperature, a) camparison between 1100 K and 1300 K, b) camparison between 1300 K and 1500 K

به ۴۳ درصد کاهش، تغییر مییابد. در این شرایط تاثیر شیمیایی تزریق دیاکسید کربن تغییرات زیادی بر روی بیشینه مقدار رادیکال هیدروکسیل نداشته و در این شرایط مقدار OH از ۲۸ درصد کاهش به ۲۷ درصد تغییر پیدا میکند.

شکل ۱۱ تغییرات غلظت رادیکال فرمالدهید در دو دمای ۱۱۰۰ و ۱۵۰۰ کلوین در شرایط تزریق ۵۰ درصد گونه X و دی کسید کربن را با دمای ۱۳۰۰ کلوین نشان میدهد. همان طور که مشاهده میشود، با افزایش دمای پیش گرمایش نرخ کلی آزادسازی حرارت به علت افزایش میزان فرمالدهید منتشر شده افزایش مییابد. مطابق

با نتایج بدست آمده با افزایش دما تاثیر شیمیایی حضور دی کسید کربن در واکنشها منجر به افزایش میزان فرمالدهید ($\rm CH_2O$) آزاد شده می گردد که این موضوع به علت افزایش نرخ واکنش $\rm ch_2(s)+\rm CO} + \rm CO} + \rm CH_2O$ با افزایش دمای پیش گرمایش می باشد که افزایش میزان فرمالدهید منتشر شده را منجر خواهد شد. علاوهبر این می توان مشاهده کرد که با افزایش دما از تاثیر فیزیکی تزریق دی اکسید کربن درون اکسیدکننده کاسته می شود که این موضوع به علت کاهش در نرخ واکنش های موثر در تولید رادیکال فرمالدهید می باشد.



شکل ۱۲: اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن درون اکسیدکننده بر کسر جرمی کربن مونوکسید تشکیل شده در فاصله ۹۰ سانتی متری مشعل برای دماهی پیشگرمایش مختلف، الف) مقایسه دمای ۱۱۰۰ و ۱۳۰۰ کلوین، ب) مقایسه دمای ۱۳۰۰ و ۱۵۰۰ کلوین

Fig. 12: Chemical and physical effects of CO2 injection into oxidizer on the CO mass fraction in 90cm from burner inlet for different preheating temperature, a) camparison between 1100 K and 1300 K, b) camparison between 1300 K and

۴–۳–۲- تاثیر میزان دمای پیش گرمایش اکسیدکننده بر اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن روی انتشار آلاینده مونواکسیدکربن و ناکس

شکل ۱۲ مقایسه تغییرات کسر جرمی مونوکسید کربن در فاصله ۹۰ سانتی متری از ورودی مشعل به ازای دمای ۱۱۰۰، ۱۳۰۰ و ۱۵۰۰ کلوین را نشان میدهد. همانگونه که مشاهده میشود با افزایش دمای ورودی تاثیر شیمیایی تزریق دیاکسید کربن به صورت قابل توجهی افزایش پیدا میکند. این تاثیر به گونهای است که در دمای ۱۵۰۰ کلوین اثرات شیمیایی حاصل از حضور دیاکسید کربن در واکنش های

تولیدی میشود در حالی که در دمای ۱۱۰۰ کلوین تاثیر شیمیایی تزریق منجر به افزایش ۸۰۰۸ در کسر جرمی مونوکسید کربن تولیدی میشود. علت این امر افزایش نرخ واکنش و فعالیت واکنشهایی است که در آنها دیاکسید کربن تجزیه شده و به مونواکسید کربن تبدیل می گردد که مهمترین واکنش با بررسی نرخ واکنشهای شیمیایی می گردد که مهمترین واکنش با بررسی نرخ واکنشهای شیمیایی مقایسه با تزریق شیمیایی تاثیر بسیار کمتری داشته و با توجه به نتایج حاصل شده این موضوع مستقل از دمای پیش گرمایش ورودی است.

شیمیایی منجر به افزایش ۰/۰۴۵ در بیشینه مقدار مونوکسید کربن



شکل ۱۳: اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن درون اکسیدکننده بر کسر جرمی ناکس تشکیل شده در فاصله ۹۰ سانتی متری مشعل برای دماهی پیشگرمایش مختلف، الف) مقایسه دمای ۱۱۰۰ و ۱۳۰۰ کلوین، ب) مقایسه دمای ۱۳۰۰ و ۱۵۰۰ کلوین

حضور دی اکسید کربن در واکنش NO+NCO→₂+CO₂ و در نتیجه افزایش میزان آلاینده ناکس منتشر شده با وجود کاهش دمای بیشینه احتراقی می شود. با توجه به نتایج بدست آمده مشاهده می شود که تزریق دی اکسید کربن منجر به کاهش توزیع میزان ناکس تا نصف میزان ناکس در حالت تزریق نیتروژن می شود. در شرایط تزریق نیتروژن علاوهبر دمای بالای احتراق و انتشار ناکس از طریق مکانیزم حرارتی، میزان نیتروژن در دسترس بیشتر نیز عاملی برای افزایش ناکس تولیدی است. شکل ۱۳ تاثیر میزان دمای پیش گرمایش مخلوط ورودی بر آلاینده ناکس را نشان میدهد. همان طور که مشاهده می شود با افزایش دمای ورودی میزان آلاینده ناکس منتشر شده نیز افزایش پیدا می کند. علاوهبر این تاثیر فیزیکی تزریق دی اکسید کربن درون اکسیدکننده به علت کاهش بیشینه دمای احتراق منجر به کاهش میزان آلاینده ناکس تولید شده به صورت قابل توجه می گردد. برخلاف تاثیر فیزیکی، تاثیر شیمیایی تزریق دی اکسید کربن منجر به افزایش میزان ناکس منتشر شده می گردد. این موضوع به علت

Fig. 13: Chemical and physical effects of CO2 injection into oxidizer on the NOx mass fraction in 90cm from burner inlet for different preheating temperature, a) camparison between 1100 K and 1300 K, b) camparison between 1300 K and 1500 K

۵- جمعبندی

با توجه به چالش گرمای جهانی در سالهای اخیر و انجام مطالعات گسترده بر روی روشهای مختلف به منظور کاهش گازهای انتشار دی کسید کربن به عنوان اصلی ترین گاز گلخانهای، در مطالعه حاضر به بررسی عددی تاثیر تزریق دیاکسید کربن درون اکسید کننده در احتراق متان/هیدروژن-هوای بدون شعله پرداخته شد. بدین منظور از مشعل احتراقی جی.اچ.سی جهت انجام بررسیها استفاده گردیده و تاثیر تزریق مقادیر مختلف دی کسید کربن درون اکسید کننده مورد مطالعه و بررسی قرار گرفت. با توجه به پیشگرمایش مخلوط احتراقی در احتراق بدون شعله تا دمای خوداشتعالی، اثر دمای پیش گرمایش به عنوان یکی از پارامترهای اصلی در این احتراق نیز مورد مطالعه و بررسی قرار گرفت. در مطالعه حاضر تغییرات رادیکال هیدروکسیل به منظور بررسی تاثیر تزریق دیاکسید کربن در شرایط مختلف مورد بررسی بر روی میزان نرخ واکنشها به عنوان یکی از اصلی ترین کمیتهای مورد بررسی در فرآیند احتراق مورد بررسی قرار گرفته است. تغییرات مربوط به رادیکال فرمالدهید نیز به منظور بررسی تغییرات میزان گرمای آزاد شده در شرایط مختلف مورد بررسی در مطالعه حاضر مورد توجه قرار گرفته است. همچنین نتایج مربوط به اثرات فیزیکی و شیمیایی تزریق دیاکسید کربن بر روی آلایندههای کربن مونوکسید و ناکس تحت شرایط تزریق مقادیر مختلف دیاکسید کربن و همچنین بررسی اثر پیش گرمایش بر روی این تزریق مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است. مهمترین نتایج بدست آمده در مطالعه حاضر عبارتند از:

الف- افزایش میزان دیاکسید کربن تزریق شده منجر به کاهش میزان نرخ واکنشها از طریق کاهش غلظت رادیکال هیدروکسیل می گردد. علاوهبر این با افزایش مقادیر تزریق به علت کاهش بیشینه دما میزان آلاینده ناکس تولید شده نیز به صورت قابل توجهی کاهش پیدا می کند.

ب- واکنشهای تجزیه دیاکسید کربن به مونوکسید کربن در سینتیکهای شیمیایی در شرایط تزریق دیاکسید کربن درون اکسیدکننده اهمیت بسیار بالایی در پیشبینی میزان حرارت آزاد شده و توزیع آلایندههای کربن مونوکسید و ناکس دارد. این اهمیت با افزایش میزان دیاکسید کربن تزریق شده به صورت قابل توجهی افزایش مییابد که این موضوع به علت افزایش اهمیت تاثیر شیمیایی

تزریق دی کسید کربن در شرایط تزریق مقادیر بالاتر آن درون اکسیدکننده می باشد.

ج- با افزایش دمای پیش گرمایش اکسیدکننده میزان تاثیر شیمیایی تزریق دیاکسید کربن درون جریان اکسیدکننده افزایش یافته و میزان مونوکسید کربن تولید شده به صورت قابل توجهی تغییر میکند. با افزایش دمای پیش گرمایش نقش واکنشهای تجزیه دیاکسید کربن به خصوص واکنش میابد.
تجزیه دیاکسید کربن به مونواکسید کربن به خصوص واکنش میابد.
تجزیه دیاکسید کربن به مونواکسید کربن به خصوص واکنش در تعزیه دیاکسید کربن به میابد.
د- افزایش دمای پیش گرمایش افزایش مییابد.
د- افزایش دمای پیش گرمایش اکسیدکننده منجر به تغییر در مقادیر رادیکالهای هیدروکسیل و فرمالدهید میشود. در این شرایط غلظت رادیکال هیدروکسیل افزایش پیدا کرده و به صورت شرایط نیاز می این بیانگر توزیع حرارت یکنواخت می میاشد.

مراجع

- G.G. Szego, Experimental and numerical investigation of a parallel jet MILD combustion burner system in a laboratory-scale furnace, 2010.
- [2] P. Li, J. Mi, B. Dally, F. Wang, L. Wang, Z. Liu, S. Chen, C. Zheng, Progress and recent trend in MILD combustion, Science China Technological Sciences, 54(2) (2011) 255-269.
- [3] H. Tsuji, A.K. Gupta, T. Hasegawa, M. Katsuki, K. Kishimoto, M. Morita, High temperature air combustion: from energy conservation to pollution reduction, CRC press, 2002.
- [4] A. Cavaliere, M. de Joannon, Mild combustion, Progress in Energy and Combustion science, 30(4) (2004) 329-366.
- [5] G. Szegö, B. Dally, G. Nathan, Operational characteristics of a parallel jet MILD combustion burner system, Combustion and Flame, 156(2) (2009) 429-438.
- [6] M.M. Maroto-Valer, Developments and Innovation in Carbon Dioxide (CO2) Capture and Storage Technology: Carbon Dioxide (CO2) Storage and Utilisation, Elsevier, 2010.
- [7] Y. Tu, K. Su, H. Liu, S. Chen, Z. Liu, C. Zheng, Physical and chemical effects of CO2 addition on

in methane oxy-fuel combustion, International Journal of Heat and Mass Transfer, 86 (2015) 622-628.

- [15] F.C. Christo, B.B. Dally, Modeling turbulent reacting jets issuing into a hot and diluted coflow, Combustion and flame, 142(1-2) (2005) 117-129.
- [16] B.B. Dally, A. Karpetis, R. Barlow, Structure of turbulent non-premixed jet flames in a diluted hot coflow, Proceedings of the combustion institute, 29(1) (2002) 1147-1154.
- [17] J. Mi, P. Li, B.B. Dally, 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, 23(11) (2009) 5349-5356.
- [18] A. Mardani, S. Tabejamaat, M. Ghamari, Numerical study of influence of molecular diffusion in the Mild combustion regime, Combustion Theory and Modelling, 14(5) (2010) 747-774.
- [19] P. Cumber, M. Fairweather, H. Ledin, Application of wide band radiation models to non-homogeneous combustion systems, International Journal of Heat and Mass Transfer, 41(11) (1998) 1573-1584.
- [20] C. Bowman, R. Hanson, W. Gardiner, V. Lissianski, M. Frenklach, M. Goldenberg, G. Smith, GRI-Mech 2. 11: An Optimized Detailed Chemical Reaction Mechanism for Methane Combustion and NO Formation and Reburning, NASA, (19980005146) (1997).

CH4/H2 flames on a Jet in Hot Coflow (JHC) burner, Energy & Fuels, 30(2) (2016) 1390-1399.

- [8] Y. Tu, H. Liu, W. Yang, Flame Characteristics of CH4/ H2 on a Jet-in-Hot-Coflow Burner Diluted by N2, CO2, and H2O, Energy & Fuels, 31(3) (2017) 3270-3280.
- [9] L. Wang, Z. Liu, S. Chen, C. Zheng, J. Li, Physical and chemical effects of CO2 and H2O additives on counterflow diffusion flame burning methane, Energy & fuels, 27(12) (2013) 7602-7611.
- [10] S. Chen, H. Liu, C. Zheng, Methane combustion in MILD oxyfuel regime: Influences of dilution atmosphere in co-flow configuration, Energy, 121 (2017) 159-175.
- [11] Z. Mei, J. Mi, F. Wang, C. Zheng, Dimensions of CH4-jet flame in hot O2/CO2 coflow, Energy & Fuels, 26(6) (2012) 3257-3266.
- [12] J. Park, J.S. Park, H.P. Kim, J.S. Kim, S.C. Kim, J.G. Choi, H.C. Cho, K.W. Cho, H.S. Park, NO emission behavior in oxy-fuel combustion recirculated with carbon dioxide, Energy & fuels, 21(1) (2007) 121-129.
- [13] N. Gascoin, Q. Yang, K. Chetehouna, Thermal effects of CO 2 on the NO x formation behavior in the CH 4 diffusion combustion system, Applied Thermal Engineering, 110 (2017) 144-149.
- [14] Y. Song, C. Zou, Y. He, C. Zheng, The chemical mechanism of the effect of CO 2 on the temperature