



CFD Analysis of NO_x Formation in Biodiesel Non-premixed Turbulent Flame

A. Jomekian^{1*}, B. Bazooyar², A. Shariati³, S. H. Hashemabadi⁴

1- Assistant Professor of Chemical Engineering, Esfayaren University of Technology

2- Postdoctoral Researcher Mechanics Engineering, Brunel University London

3- Professor of Chemical Engineering, Petroleum University of Technology

4- Professor of Chemical Engineering, Iran University of Science and Technology

Email: a.jomekian@esfarayen.ac.ir

Abstract

This paper presents a computational fluid dynamics (CFD) analysis of nitrogen monoxide (NO) and nitrogen dioxide (NO₂) formation in a biodiesel turbulent non-premixed flame via Eulerian-Lagrangian concept. The model includes governing conservation equation of mass, momentum and energy, and equations representing the tabulation and transport of NO_x (NO+NO₂). Discrete Ordinates (DO) was exploited for modeling of heat radiation that increases the accuracy of the computational simulation in prediction of NO. The temperatures, and concentration of NO_x are presented and compared with experimentation. The proposed model is able to accurately predict the formation of NO_x under many circumstances. However, some discrepancies between the model and experimental data exist because of the surrogate combustion mechanism employed for biodiesel fuel and absence of prompt NO in the combustion mechanism employed in CFD codes.

Received: 26 May 2023
Accepted: 2 August 2023
Page Number: 109-122

Keywords:

NO_x Pollutants,
Non-Premixed,
Turbulent Flame,
Biodiesel,
CFD,
Combustion

Please Cite this Article Using:

Jomekian, A., Bazooyar, B., Shariati, A., & Hashemabadi, S. H. (2024). CFD Analysis of NO_x Formation in Biodiesel Non-premixed Turbulent Flame. *Iranian Chemical Engineering Journal*, 23(134), 109-122, [In Persian].



شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) تشکیل آلاینده ناکس در شعله از قبل نامختلط و آشفته بیودیزل

ابوالفضل جمعه‌کیان^{۱*}، بهامین بازویار^۲، احمد شریعتی^۳، سید حسن هاشم‌آبادی^۴

۱- استادیار مهندسی شیمی و مواد، مجتمع آموزش عالی فنی و مهندسی اسفراین

۲- پژوهشگر پسا دکتری مهندسی مکانیک و هوافضا، دانشگاه برونل لندن

۳- استاد مهندسی گاز، دانشگاه صنعت نفت

۴- استاد مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران

پیام نگار: a.jomekian@esfarayen.ac.ir

چکیده

تشکیل اکسیدهای نیتروژن (ناکس) در شعله آشفته از قبل نامختلط^۱ بیودیزل از دیدگاه اولری- لاگرانژی^۲ در این مقاله بررسی شد. ابتدا احتراق به وسیله دینامیک سیالات محاسباتی^۴ مدل شد. تخمین مشخصه‌های جریان سیال واکنش دهنده در شعله آشفته، به وسیله حل معادلات موازنه جرم، مومنتم، انرژی، تولید و انتقال ناکس است. از مدل ترتیب گسسته^۵ برای مدل تشعشع و افزایش دقت پیش‌بینی مدل در مشخص کردن دما و سطح اجزا استفاده شد. دمای احتراق و غلظت آلاینده منوکسید نیتروژن ارائه و با آزمایش‌ها مقایسه شد. مدل ارائه شده توانایی قابل قبول در محاسبه سطح آلاینده منوکسید نیتروژن از خود نشان داد. اختلاف میان سطح آلاینده ناکس در مدل و آزمایش‌ها ناشی از به کارگیری سازوکار احتراق ساده شده برای بیودیزل و نبود میسر القایی^۶ تشکیل منوکسید نیتروژن در آن سازوکار احتراق است. از مدل برای بررسی پراکندگی اکسیدهای نیتروژن در محیط احتراق استفاده شد. نتایج حاکی از تشکیل اکسیدهای نیتروژن در نواحی بعد از شکل‌گیری شعله است.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۳/۰۵

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۵/۱۱

شماره صفحات: ۱۰۹ تا ۱۱۲

کلیدواژه‌ها:

آلاینده‌های ناکس،

شعله آشفته از قبل نامختلط،

بیودیزل،

دینامیک سیالات محاسباتی،

احتراق

* خراسان شمالی، مجتمع آموزش عالی فنی و مهندسی اسفراین، گروه مهندسی شیمی و مواد

استناد به مقاله:

جمعه‌کیان، ابوالفضل، بازویار، بهامین، شریعتی، احمد، و هاشم‌آبادی، سید حسن. (۱۴۰۳). شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) تشکیل آلاینده

ناکس در شعله از قبل نامختلط و آشفته بیودیزل، نشریه مهندسی شیمی ایران، ۲۳(۱۳۴)، ۱۰۹-۱۲۲.

1. NOX

4. Computational Fluid Dynamics

2. Nonpremixed Combustion

5. Discrete Ordinate (DO)

3. Eulerian Lagrangian

6. Prompt NOX-Fenimore NOX

کنترل آلاینده‌های اکسیدهای نیتروژن و افزایش بازده تولید و انتقال انرژی دو عامل مهم در بهینه‌سازی سامانه‌های احتراق صنعتی است [۱]. در مشعل‌های مایع، یک چالش مهم در بهینه‌سازی عملکرد واحد این است که همیشه افزایش تولید و انتقال انرژی با تشکیل بیشتر آلاینده همراه است [۲]. برای بهینه‌سازی هم‌زمان آلاینده اکسیدهای نیتروژن و بازده انرژی، تعیین سطح و پراکندگی آلاینده ناکس در سامانه‌های احتراق واجب است. از این راه برهم‌کنش سایر اکسیدهای نیتروژن با متغیرهای احتراق را می‌توان به سادگی به دست آورد [۳].

در شعله‌های آشفته از قبل نامختلط که در مشعل‌های مایع بسیار معمول هستند؛ تولید، مصرف و انتقال ناکس بازه گسترده زمانی و مکانی را در امتداد ساختار جریان پوشش خواهد داد. چنین مطالعه‌ای مطالعه آلاینده ناکس و مشخصات جریان را جدایی‌ناپذیر می‌کند [۴ و ۵]. متأسفانه در حال حاضر، چنین مطالعاتی از دیدگاه آزمایشگاهی قابل بررسی نیست؛ زیرا وسایل آزمایشگاهی هنوز قابلیت محاسبه و اندازه‌گیری مشخصات جریان در بازه‌های زمانی پایین را ندارند و به‌ناچار این محاسبات از راه ریاضی و مدل‌سازی قابل انجام و بررسی هستند.

مدل‌های بسیاری برای مطالعه آلاینده ناکس در شعله‌های آشفته موجود است [۶ و ۷]. در میان آن‌ها یک روش بسیار مهم که نسبتاً زیاد استفاده شده، در نظرگیری آلاینده ناکس در کنار سایر مشخصه‌های جریان در دینامیک سیالات محاسباتی است [۸ و ۹]. دینامیک سیالات محاسباتی توانایی بسیار زیادی در پیش‌بینی خواص سیالات در احتراق و با مدل‌سازی تجهیزات انتقال حرارت نظیر کوره یا مبدل‌های حرارتی دارد [۱۰ و ۱۱]. استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی برای کنترل آلاینده نیز گزارش شده است؛ مثلاً گوهری و همکاران [۱۲ و ۱۳]. برای کنترل آلاینده ناکس می‌توان از سامانه‌های فشرده و کاتالیستی احتراق نیز بهره جست [۱۴ و ۱۵]. در احتراق مایعات، یک مشخصه بسیار مهم که اندکی جلب توجه کرده، برهم‌کنش میان ذرات در حال تبخیر و محیط فعال از لحاظ شیمیایی است. برای سوخت بیودیزل، انتخاب سازوکار احتراق مهم است؛ زیرا که این سوخت دارای شیمی پیچیده و متشکل از ده‌ها جزء شیمیایی است [۱۶]. چندین سازوکار احتراق جانشین برای

سوخت بیودیزل تاکنون تدوین شده است که فیشر و پیتز [۱۷] و هم‌چنین براکورا و ریتز [۱۸] بررسی کرده‌اند. اگرچه، توانایی این سازوکارهای احتراق برای تعیین مشخصات بیودیزل در سامانه‌های احتراق واقعی هنوز آزمون نشده است.

چالش دیگر که بیشتر در طراحی و عملکرد مشعل‌های صنعتی مطرح است، بالابردن توانایی این مشعل‌ها برای کارکردن با انواع سوخت‌هاست [۱۹]. بیودیزل یکی از سوخت‌های تجدیدپذیر است که به‌عنوان جای‌گزین سوخت دیزل در مشعل‌ها مد نظر بوده است. اگرچه احتراق آن در سامانه‌های احتراق با مشکلاتی همراه است (تشکیل زودهنگام گاز دی‌اکسید کربن [۲۰] افزایش فرمالدئیدها [۲۱]، پلیمری کردن [۲۲]، تشکیل کک [۲۳] و تشکیل بیشتر ناکس [۲۴ و ۲۵]). مطالعات دینامیک سیالات محاسباتی برای پیدا کردن برهم‌کنش میان آلاینده ناکس و مشخصات جریان‌های ورودی، شرایط مورد نیاز استوکیومتری و غلظت اجزای مهم در گازهای متصادف شده از احتراق بیودیزل، می‌تواند برای استانداردسازی احتراق بیودیزل به کار گرفته شود. این مقاله گامی در راستای این اهداف برداشته و مدلی برای پیش‌بینی آلاینده منوکسید نیتروژن سوخت بیودیزل ارائه می‌کند.

در شعله‌های از قبل نامختلط، نتایج شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی همراه و هم‌سو با آزمایش‌هاست. این نتایج بیانگر افزایش تولید ناکس و کاهش تولید دی‌اکسید کربن با به‌کارگیری بیودیزل است [۲۶]. نتایج مدل‌سازی بر این اصل معمولاً اتفاق نظر دارند؛ اگرچه، اختلاف ناچیز ممکن است در برخی موارد مشاهده شود. این به‌علت تفاوت در مشخصات انژکتورهای به‌کاررفته برای اسپری کردن بیودیزل و دیزل است. مدل‌ها و نتایج آزمایشگاهی زیادی برای تعیین مشخصات اسپری سوخت موجود است. در برخی موارد بیودیزل به‌علت داشتن گران‌روی بالاتر نمی‌تواند کیفیت احتراق شبیه سوخت معمول دیزل داشته باشد [۲۷ و ۲۸]. نتایج دینامیک سیالات محاسباتی که احتراق مخلوط بیودیزل را با دیزل مقایسه کردند، عملاً تفاوتی میان این مخلوط‌ها گزارش نکردند، هنگامی که درصد بیودیزل زیر ۲۵ درصد حجمی است [۲۹].

متیل استر روغن کلزا^۱ به‌عنوان سوخت انتخاب شد. مشخصات مشعل و شرایط عملیاتی بویلر نیمه‌صنعتی در آزمایشگاه انتقال

1. Rapeseed oil Methyl Ester

حرارت دانشکده مهندسی نفت اهواز بررسی و در مدل‌سازی لحاظ شد. دینامیک سیالات محاسباتی برای شبیه‌سازی تشکیل ناکس به کار گرفته و نتایج حاصل از شبیه‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی مقایسه شد. نتایج برای بررسی انتشار و گسترش اکسیدهای نیتروژن در شعله آشفته از قبل نامخلط بیودیزل به کار گرفته شدند. معمولاً ناکس از اجزا و اکسیدهای نیتروژن متفاوتی تشکیل شده است. در محیط احتراق بنابر شرایط اجزای اصلی ناکس منوکسید نیتروژن و دی‌اکسید نیتروژن است. سایر اکسیدهای نیتروژن، مانند اکسیدنیتروس^۱ اگرچه دارای طول عمر بسیار زیادی هستند، مقدار بسیار کم و غیرقابل اندازه‌گیری خواهند داشت [۳۰].

۲- شبیه‌سازی

۲-۱ مشخصه‌های شبیه‌سازی

شبیه‌سازی در شش مرحله کلی که به‌وسیله کلارو و پرتیرو پیشنهاد شده، انجام شد [۳۱]. شبیه‌سازی احتراق شامل اتمیزاسیون سوخت، تبخیر قطرات مایع، پیرولیز^۲، اختلاط قطرات با اکسیدانت^۳ و محصولات گرم احتراق و نفوذ و واکنش شیمیایی اجزای فعال است. اطلاعات بیشتر را در مورد فیزیک مسئله، می‌توان در مرجع [۳۲] یافت.

۲-۲ هندسه و اندازه دامنه محاسباتی

از مدول انسیس^۴ برای تولید عنصر^۵ هم‌اندازه مکعبی شکل استفاده شد. شکل (۱) پیکره دامنه محاسباتی را که در آن روند کلی شکل مش نمایش داده شده، نشان می‌دهد. شبیه‌سازی برای تعداد متفاوتی عناصر در شبکه ایجاد شده برای دامنه محاسباتی، انجام شد. برای شبکه با تعداد عنصر بیش از ۴۳ هزار تغییرات مشخصه‌های احتراق زیر از ۵ درصد است. بنابراین دامنه با ۴۲ هزار و ۹۶۲ عنصر برای محاسبات انتخاب شد. نتایج استقلال از مش در ضمیمه مقاله ارائه شده است. عنصرها در شبکه دارای اندازه‌های متفاوتی هستند؛ عنصرهای کوچک‌تر در جاهایی از دامنه که دامنه تغییرات زیادتر است؛ مانند نزدیک نازل سوخت در نظر گرفته شد و در جاهایی از دامنه محاسباتی که تغییرات کمتر است، عنصرهای بزرگ‌تر در نظر

گرفته شد (مانند دودکش و دیواره‌های بویلر). نصف دامنه محاسباتی دارای یک محور به‌وسیله نرم‌افزار ترسیم شد.

مرکز مختصات بر روی محور دامنه محاسباتی در جایی که نازل سوخت دامنه را لمس می‌کند، در نظر گرفته شد. طول محفظه احتراق بویلر و دامنه محاسباتی ۱۰۶۰ میلی‌متر است. عرض دامنه در کل ۵۱۵ میلی‌متر است. در شکل (۱) به‌علت این‌که نیمی از دامنه در محاسبات لحاظ شده است، عرض دامنه ۲۵۷/۵ میلی‌متر در نظر گرفته شد. عرض ورودی نازل سوخت ۰/۵ میلی‌متر در دامنه محاسباتی در نظر گرفته شد. این معادل قطر ۱ میلی‌متری نازل سوخت است، هنگامی که دامنه محاسباتی به‌صورت کامل در نظر گرفته شود. برای کانال هوای ورودی به محفظه احتراق عرض کانال ۴۲/۵ میلی‌متر در نظر گرفته شد. برای محاسبات، دامنه فوق باید با شرایط مرزی مناسب وارد نرم‌افزار فلونت شود. این دامنه با دیواره‌های ابتدایی، میانی، نازل و پاشنده سوخت، کانال ورودی هوا و محور برای چرخش دامنه در نظر گرفته شد. در بخش ۲-۵ شرایط مرزی به‌صورت مفصل توضیح داده خواهد شد.

۲-۳ مشخصات سوخت بیودیزل

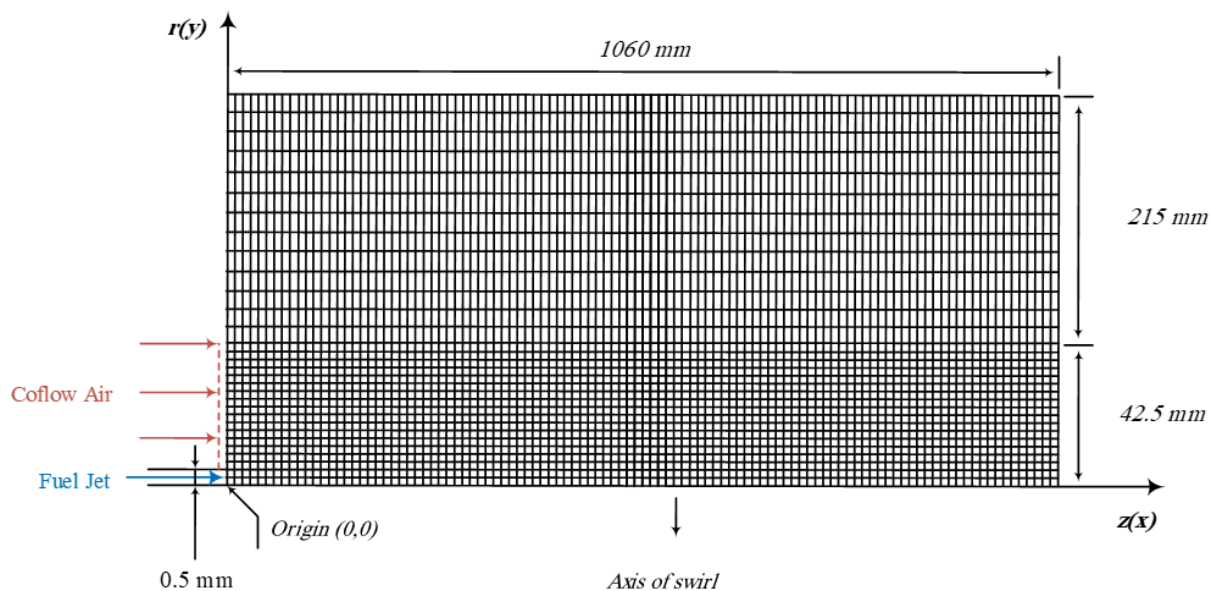
بیودیزل که برای آنالیز آزمایشگاهی و مدل‌سازی استفاده شد، متیل استر روغن کلزاست. برخی خصوصیات فیزیکی^۶ متیل استر کلزا از درون مقالات ارائه شده درباره این سوخت‌ها استخراج شد. این خصوصیات در شبیه‌سازی‌های استفاده شده به کار گرفته شد. جدول (۱) شامل خصوصیات بیودیزل است.

۲-۴ مدل هوای چرخشی

جریان هوا پیش از دمیده شدن به درون محفظه احتراق از روی یک دیفیوزر^۷ هوا عبور داده می‌شود که دارای دو قسمت مجزاست: هوای اولیه که چرخش^۸ ندارد و هوای ثانویه که دارای چرخش است. این چرخش به‌علت نیروهای گردشی است که هوا هنگام عبور از روی دیفیوزر به‌دست می‌آورد. جدول (۲) خصوصیات دیفیوزر هوا را نمایش می‌دهد. برای به‌دست آوردن نسبت هوای چرخشی به هوای محوری از معادله ارائه شده در کار قبلی همکاران استفاده شد [۳۲].

1. N₂O
2. Pyrolysis
3. Oxidant
4. Ansys ICEM CFD
5. Element

6. Physical Properties
7. Diffuser
8. Swirl



شکل ۱. طرح‌واره کلی مش‌بندی در پیکره دامنه محاسباتی طراحی شده برای اعمال در دینامیک سیالات محاسباتی.

Figure 1. The general scheme of meshing in computational domain designed for application in CFD.

جدول ۱. مشخصات سوخت بیودیزل به کار گرفته شده در شبیه‌سازی احتراق [۳۳].

Table 1. The properties of the biodiesel fuel used in combustion simulation by CFD [33].

Property	Unit	Value
Molecular weight	kg/kmol	281
Air to fuel stoichiometry	-	12.28
Density	kg/m ³	889.5
Specific heat [27]	J/kg.K	1402.3
Heat conductivity	W/m.K	0.153
Viscosity	kg/m. s	0.005405
Latent Heat	kJ/kg	115000
Boiling point	K	622.65
Saturated vapor pressure	pa	110000
Surface tension	N/m	0.02879

جدول ۲. مشخصات ساختاری دیفیوزر هوای به کارگیری شده.

Table 2. The characteristics of utilized air diffuser.

Parameter	Unit	Value	Symbol
Number of spins	-	1.87	S _{o,th}
Number of channels	-	5	n
Fin angle	°	37.5	α
Channel height	cm	3	B
Outside diameter	cm	3.5	R _o
Inside diameter	cm	1.25	r _o
Maximum angle	degree	37.5	ζ_m

۲-۵ شرایط مرزی

دامنه محاسباتی با شرایط مرزی^۱ مناسب ترسیم شد. دامنه به صورت هم‌محور چرخشی^۲ وارد نرم‌افزار انسیس فلونت^۳ شد. محفظه احتراق^۴ از جنس استیل ضد زنگ با ضخامت ۱ سانتی‌متر در نظر گرفته شد. برای نازل سوخت و هوای ورودی از شرط مرزی جرم عبوری^۵ استفاده شد. برای دیواره‌های افقی، انتقال حرارت جابه‌جایی اجباری با ضریب مشخص در نظر گرفته شد. این ضریب از روی میزان حرارت خروجی از دیواره بویلر و رسیده به آب حساب شد. برای محاسبه انتقال حرارت از داده‌های آزمایشگاهی بهره گرفته شد. انتقال جابه‌جایی آزاد برای دیواره ابتدایی در نظر گرفته شد. ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی آزاد ۱۲ W.m⁻².K⁻¹ و دمای محیط ۲۹۸/۱۵°C در نظر گرفته شد. فشار احتراق اتمسفریک بود و در خروجی از شرط مرزی گرادیان فشار صفر^۶ استفاده شد.

برای اطمینان از هم‌گرایی معادلات در هنگام حل، دمای خروجی کنترل شد. هنگامی که متوسط دمای خروجی و میزان باقی‌مانده معادلات به میزان قابل توجهی کاهش یافت، شبیه‌سازی متوقف و نتایج استخراج شد. بخش بعدی به تفصیل معادلات و مراجع استفاده شده برای تعیین مشخصات سوخت و شعله بیودیزل معرفی و ارائه خواهد گشت.

۲-۶ معادلات حاکم

روش دوفاز اولر- لاگرانژ برای شبیه‌سازی احتراق و آلاینده منوکسید نیتروژن به کار گرفته شد. هر دو فاز گاز و مایع در شبیه‌سازی لحاظ شدند تا یک دیدگاه واقع‌گرایانه از فرآیند فیزیکی احتراق در مدل توسعه‌یافته به کار گرفته شود. این معادلات شامل معادلات حاکم بر جریان فاز گاز و فاز مایع است. معادلات حاکم در نرم‌افزار بخش فلونت حل شدند و در این مقاله گزارش می‌شوند.

۲-۶-۱ معادلات حاکم در فاز مایع

اتمی‌زاسیون، انتقال و توزیع قطرات بیودیزل برای فاز مایع مدل شدند. مدل اتمی‌زاسیون ناپایدار^۷ که به وسیله سنکال [۳۴] ارائه شده،

برای مدل کردن تولید قطرات در اتمایز مشعل^۸ به کار گرفته شد. مدل توزیع ذرات و زمان عمر برای قطرات تشکیل شده در دامنه محاسباتی از راه این معادله ریاضی به دست می‌آید. پراکندگی ذرات به علت آشفته‌گی با استفاده از مدل پیاده‌روی تصادفی^۹ مدل شد. این مدل یک ابر را برای یک قطره حول مسیر آن در نظر می‌گیرد. حرکت یک ذره از میانگین هم‌بستگی^{۱۰} معادله حرکت برای تمام قطرات آن ابر به دست خواهد آمد.

از معادله چگالی توزیع وزنی^{۱۱} با توزیع گوسی^{۱۲} برای حل معادلات مربوط به قطرات در یک ابر استفاده شد. از معادله لاگرانژ برای حل قطرات سوخت در فاز گاز استفاده شد. در نهایت از معادله لاگرانژ برای انتقال قطرات مایع در محفظه احتراق استفاده شد:

$$\frac{du_p}{dt} = F_D (U - U_p) + \frac{g_x (\rho_p - \rho)}{\rho_p} + F_x \quad (1)$$

۲-۶-۲ معادلات فاز گاز

معادلات حاکم عبارت‌اند از: (۱) معادله پیوستگی^{۱۳} (۲) معادله نویر استوکس^{۱۴} (۳) موازنه و انتقال انرژی. برهم‌کنش میان قطرات سوخت و فاز گاز در ترم انباشتی^{۱۵} معادلات فاز گاز لحاظ شدند. اکثر شعله‌های از قبل نامختلط آشفته هستند؛ زیرا که اختلاط هوا و سوخت، آزادسازی مقدار زیادی گرما را در حجم کوچک میسر خواهد کرد [۳۵]. از این رو، مدل کردن آشفته‌گی در تعیین مشخصات شعله‌های از قبل نامختلط و سایر پدیده‌های همراه آن مانند تولید آلاینده‌ها، انتقال گرما و سیال، حیاتی و مهم است. از آنجایی که احتراق در این مدل برای طول مشخصه که بسیار بالاتر از بازه حرکتی و دامنه نوسانات سیال در هنگام آشفته‌گی است، میانگین رینولدز معادلات نویر استوکس^{۱۶} روشی حلی قابل اطمینان برای مشخص کردن خصوصیات جریان سیال به‌درون محفظه احتراق است. از مدل آشفته‌گی متنر^{۱۷} [۳۶] برای مشخص کردن پروفایل

8. Burner
9. Random Walk
10. Ensemble Average
11. Probability Density Function
12. Gaussian Distribution
13. Continuity
14. Navier-Stokes
15. Accumulation
16. Reynold-Average-Navier-Stokes
17. k- ω Shear Stress Transport (SST)

1. Boundary Conditions
2. Axisymmetric Swirl
3. Ansys Fluent
4. Combustion Chamber
5. Mass_Flow Inlet
6. Zero Pressure Gradient
7. Linearized Instability Sheet Atomization (LISA)

$$\nabla \cdot (I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s}) + (a + \sigma_s) I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \phi(\vec{s}\vec{s}') d\Omega' \quad (5)$$

که در آن

$$I(\vec{r}, \vec{s}) = \sum_k I_{k_r}(\vec{r}, \vec{s}) \Delta \lambda_k \quad (6)$$

شدت تشعشع در جهت \vec{s} و در مکان \vec{r} است. اطلاعات بیشتر در مورد معادله فوق و مشخصه‌های آن به‌طور مفصل در مراجع آورده شده است [۳۷ و ۳۲].

۲-۸ شیمی نیتروژن شعله بیودیزل

از سازوکار جای‌گزین طراحی شده پروفسور والری گلوویتچو [۳۹] شامل ۴۱۹ واکنش شیمیایی و ۱۰۱ جزء شیمیایی برای به‌دست آوردن غلظت اجزا استفاده شد. ۱۴ واکنش شیمیایی برای مشخص کردن ایجاد و تخریب اکسیدهای نیتروژن به این سازوکار احتراق اضافه و به‌کار گرفته شد [۴۱ و ۴۰] غلظت اجزای شیمیایی شعله به‌وسیله اصل فلیملت^۳ به‌دست آمد [۴۱ و ۴۰] در این مدل میانگین زمانی نوسانات کمیت‌های اسکالری مانند غلظت به کمیت‌هایی مانند درصد مخلوط^۴ و نرخ میرایی اسکالر^۵ مربوط است. از تابع توزیع چگالی وزنی^۶ به فرم دلتا برای مشخص کردن نوسانات زمانی آنتالپی و مخلوط واکنش و درنهایت برهم‌کنش میان آشفستگی و غلظت شیمیایی واکنش بهره گرفتیم. نوسانات میرایی اسکالر در نظر گرفته‌شد و نوسانات زمانی آنتالپی مستقل از میزان لحظه‌ای آن در نظر گرفته‌شد. غلظت اجزا از حل معادله انتقال درصد مخلوط و واریانس آن در دامنه محاسباتی به‌دست آمد. جریان به‌صورت دوبعدی هم‌محور- چرخشی^۷ در نظر گرفته‌شد. از خطی‌سازی^۸ مرتبه ۲ برای مشخص کردن ترم‌های مکانی شار همرفت در معادلات انتقال استفاده‌شد. از الگوریتم‌های پرستو^۹ و پیسو^{۱۰} برای فشار و اتصال فشار- سرعت^{۱۱} بهره گرفته‌شد.

3. Flamelet Concept
 4. Mixture Fraction
 5. Scalar Dissipation
 6. Probability Density Function
 7. Axial-Swirl
 8. Discretisation
 9. PRESO
 10. PISO
 11. Pressure-Velocity Coupling

سرعت مخلوط گازی در درون محفظه احتراق استفاده شد. برای مشخص کردن میزان تبادل انرژی، معادله تولید و مصرف انرژی در کنار تابع احتمال چگالی وزنی حل شدند.

معادله فیلترشده پیوستگی و میانگین رینولدز نویر استوکس به فرمت زیر هستند:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \langle \bar{\rho} \bar{u}_i \rangle}{\partial x_i} = S \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho k \bar{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \bar{G}_k - Y_k + S_k \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \omega \bar{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + G_\omega - Y_\omega + D_\omega + S_\omega \quad (4)$$

مشخصه‌های این معادلات به‌طور مفصل در مراجع [۳۷ و ۳۲] معرفی و روش محاسبه آن‌ها توضیح داده شده‌است.

۲-۷ تشعشع

مدل تشعشع نقش بسیار مهمی در بیان مشخصات احتراق دارد [۳۲]. انتقال حرارت تشعشعی برای افزایش دقت مدل در دما و آلاینده منوکسید نیتروژن (به‌خصوص ناکس گرمایی^۱) لازم است. از مدل ترتیب گسسته پیشنهادی سلکوک [۳۸] برای مدل کردن انتقال حرارت تشعشعی در محفظه احتراق استفاده شد. هیچ تأثیری از فاز پخش‌شده (منظور مایع و جامد تشکیل‌شده در حین احتراق) در تشعشع در نظر گرفته نشد؛ زیرا که شعله یک‌پارچه و احتمال تشکیل دوده در شرایط عملیاتی مدل شده از احتراق کم است. از مدل مجموع وزن گذارنده گاز خاکستری^۲ برای تعیین اثر انتشار گازها استفاده شد. هنگامی که میزان شدت انتقال حرارت تشعشعی به‌دست آمد، نرخ تغییرات بردار شار حرارت تشعشعی پیدا و در معادله موازنه انرژی در ترم انباشتگی جای‌گزین شد. معادله تشعشع در نظر گرفته‌شده برای این شعله، عبارت است از:

1. Thermal NOX-Zeldovich NOX
 2. Weighted Sum of the Grey Gas Model (WSGGM)

۳. کارهای آزمایشگاهی

برای صحت‌گذاری^۱ مدل از داده‌های آزمایشگاهی استفاده شد. در این مطالعه آزمایش‌ها: ۱. تولید سوخت بیودیزل، ۲. احتراق در بویلر آزمایشگاهی به کار رفت.

۳-۱ تولید سوخت بیودیزل

متیل استر روغن کلزا در شرایط بهینه از واکنش تبادل استری روغن ۱۰۰ درصد خالص کلزا با نسبت ۱ به ۶ برای متانول و به‌میزان ۱ درصد کاتالیست هیدروکسید پتاسیم به‌مدت ۱ ساعت در یک راکتور شیمیایی همزن‌دار در دمای ۶۰ درجه سلسیوس تولید شد [۴۲-۴۴]. بیودیزل تولیدشده خام با آب خالص شست‌وشو داده شد. این فرایند تا آنجا ادامه یافت که pH آب شست‌وشو داده شده برابر ۷ شود. متیل استرهای شسته شده در یک آون به مدت ۱ ساعت در دمای ۱۲۰ درجه سلسیوس قرار داده شد تا این که آب باقی مانده درون نمونه‌ها به‌طور کامل تبخیر شود. اطلاعات تکمیلی در مورد روش تهیه بیودیزل را می‌توان در مرجع [۴۴-۴۷] یافت.

۳-۲ احتراق در بویلر آزمایشگاهی

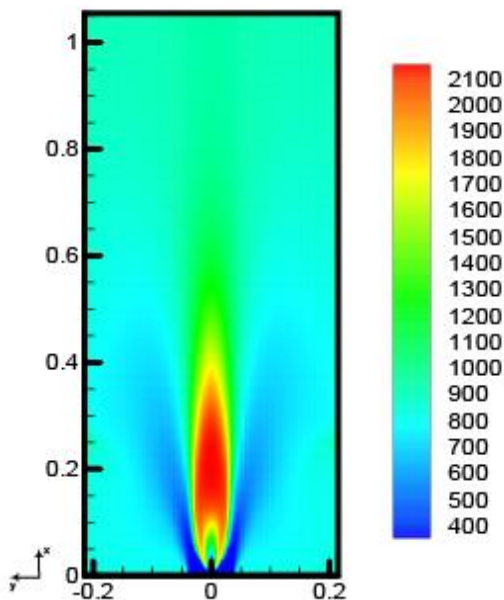
یک بویلر آزمایشگاهی مجهز به یک مشعل فشار ثابت^۲ برای آزمایش‌ها به کار گرفته شد. اندازه‌گیری دمای محلی احتراق سوخت بیودیزل در این بویلر میسر بود. مشعل در دیواره یک محفظه استوانه‌ای ساخته شده از استیل ضد زنگ به‌طور افقی سوار شد، تا آن که حرارت به‌طور مؤثری به آب درون جداره محفظه^۳ احتراق منتقل شود. این مشعل دارای یک دریچه است که به وسیله آن سوخت و هوا وارد محفظه می‌شود. جریان هوا از درون یک گلوگاه استوانه‌ای که نازل سوخت را احاطه کرده، وارد محفظه احتراق می‌شود. سوخت از درون یک نازل مخروطی توخالی^۴ شکل با زاویه پخشش ۶۰ درجه به درون محفظه احتراق پاشش می‌شود.

۴. نتایج و بحث

نتایج آنالیز دینامیک سیالات محاسباتی و آزمایش‌ها برای تشکیل ناکس در شرایط بهینه عملیاتی مشعل با یکدیگر مقایسه شد.

1. Validations
2. Constant Pressure Burner
3. Jacket
4. Hollow Cane

شکل (۲) مقادیر دما در داخل محفظه احتراق را نمایش می‌دهد. شعله به‌طور کامل افقی و توسعه یافته است. پایه شعله به شکل مخروط و منطبق بر شکل نازل تزریق کننده سوخت به درون محفظه احتراق است. شعله بعد از نازل سوخت شکل می‌گیرد. معمولاً ارتفاع بالآمدن^۵ شعله در درون آزمایش‌ها بسیار کوچک است. شبیه‌سازی ارتفاع برآمدن شعله رو به درستی و کم تخمین زده است (>1cm) است. بنابراین در هر دو آزمایش و شبیه‌سازی این ارتفاع کوچک و قابل اغماض است. در این شعله پایداری از راه جریان گرم برگشتی حاصل از احتراق ناشی از برخورد گاز به دیواره انتهایی بویلر ایجاد می‌شود. به دلیل بالابودن دمای گاز برگشتی، آشفستگی و اختلاط شدید معمولاً سوخت به‌سرعت تبخیر و محترق می‌شود. به این دلیل ارتفاع بالآمدن شعله معمولاً ناچیز است؛ عکس شعله بیودیزل در کار قبلی نویسندگان قابل مشاهده است [۳۳]. طول شعله ۴۵ سانتی‌متر است که این برابر طول شعله در آزمایش‌های بیودیزل است. عرض شعله مقداری پایین تخمین زده شده است.

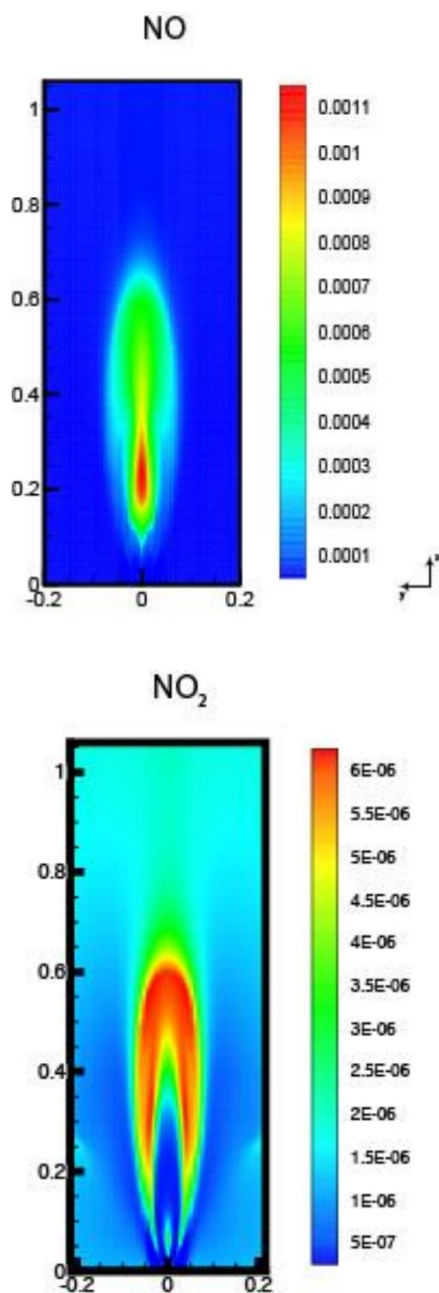


شکل ۲. نقشه کانتور شبیه‌سازی شده مربوط به دما در داخل محفظه احتراق.

Figure 2. The simulated contour map related to temperature inside combustion chamber.

5. Lift-Off Length

محفظه احتراق که شعله موجود است، بهتر است. اگرچه، دقت این مدل در شبه‌سازی ناکس پایین است و ناکس در این نواحی کمتر از حد خود تخمین زده شده است. ضعف مدل به کاررفته در بیان واکنش‌ها با سرعت شیمیایی پایین و نبود منوکسید نیتروژن القایی در سازوکار احتراق است.



شکل ۳. کانتورهای شبه‌سازی شده مربوط به غلظت آلاینده‌های دی‌اکسید نیتروژن و منوکسید نیتروژن حاصل از احتراق در بویلر.

Figure 3. The simulated contour related to the concentrations of NO_2 and NO resulted from combustion in boiler.

تولید دی‌اکسید نیتروژن از لحاظ کینتیکی محدود به نواحی با دمای

این به دلیل نبود منطقه بازگشتی^۱ در شبه‌سازی‌ها و اختلاط سوخت با هوای تازه سرد به جای گاز گرم بازگشتی است. در غیر این صورت، شعله در نقاط دوردست از نازل سوخت، به طور یک‌نواخت گسترش پیدا می‌کند و این استانداردهای احتراق درون آزمایش‌ها را برآورده می‌سازد.

قطرات سوخت از درون نازل - با یک توزیع مشخص - وارد محفظه احتراق می‌شود. به علت احتراق سریع قطرات کوچک، یک منطقه بسیار کوچک در پایین شعله که در آن سوخت در حال تبخیر است، مشاهده می‌شود. دما در محفظه احتراق می‌تواند به بالای ۲۱۰۰ کلوین برسد. این مقداری بالاتر از دمایی است که کد نوشته شده اولیکارا و بورمن [۴۸] تخمین می‌زند. دمای بیشینه شعله در پایه شعله در جایی دیده می‌شود که قطرات، تبخیر و محترق می‌شوند. این حاکی از ایجاد یک منطقه مافوق اشباع^۲ شیمیایی است.

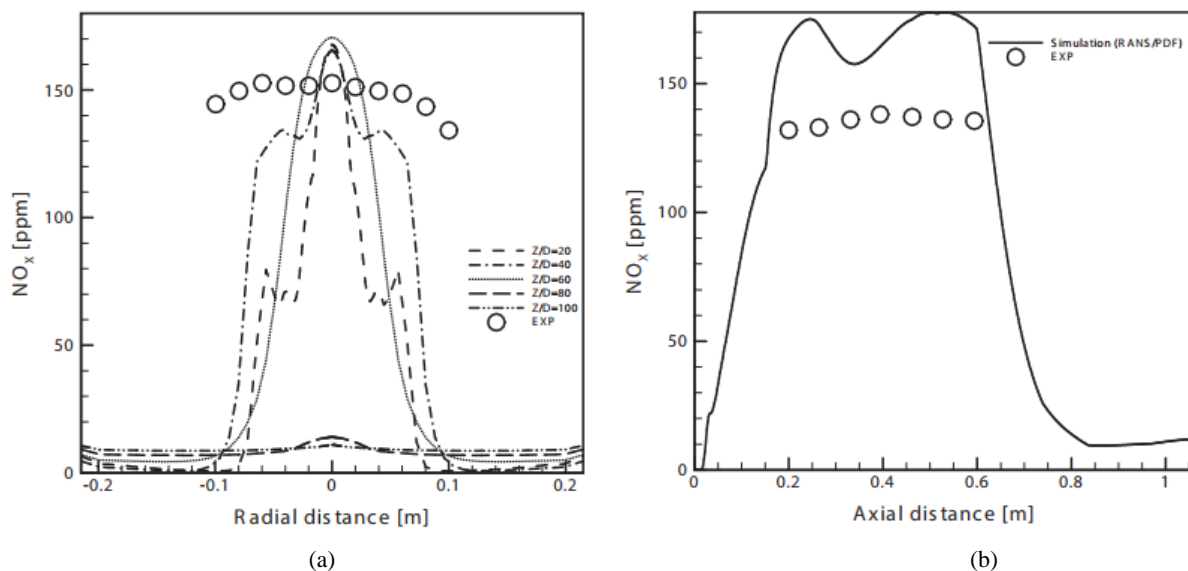
شبه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی دقت قابل قبولی در پیشگویی دماهای مشاهده شده در بویلر در نسبت‌های معادل مختلف خواهد داشت. این به علت سازوکار احتراق در نظر گرفته شده برای سوخت است که شامل اجزای میانی^۳ و اثر از هم‌گسستگی^۴ سایر ترکیبات شیمیایی مهم است. دقت بالای مدل دینامیک سیالات محاسباتی در پیشگویی دماهای محوری منجر به دقت قابل قبول مدل در توصیف شبه‌سازی آلاینده ناکس و بیان نحوه تغییرات آن می‌شود؛ زیرا سازوکار غالب در تولید این آلاینده از راه مسیر گرمایی است که به شدت به دما وابسته است. اگرچه سازوکار القایی نیز نقش مؤثری در تولید آلاینده ناکس بیودیزل دارد.

شکل (۳) کانتور آلاینده منوکسید نیتروژن و دی‌کسید نیتروژن را نمایش می‌دهد. اکثر آلاینده منوکسید نیتروژن در فواصل ۳۰ تا ۷۰ سانتی‌متری دورتر از نازل سوخت تولید می‌شود. معمولاً ناکس در بازه‌های زمانی بسیار بالاتری از سایر اجزای احتراق تشکیل می‌شود؛ این سبب می‌شود تا اکثر آلاینده منوکسید نیتروژن در مناطق و نواحی بعد از شعله تشکیل شود، در جایی که دماهای محلی هنوز بالا و شرایط برای از هم‌گسستگی نیتروژن مولکولی فراهم است. در این مناطق غالباً، واکنش‌های شیمیایی در حالت تعادلی خود هستند [۴۹-۵۳]. دقت شبه‌سازی ناکس در مناطقی از

1. Recirculation Zone
2. Superequilibrium
3. Intermediate Species
4. Dissociation

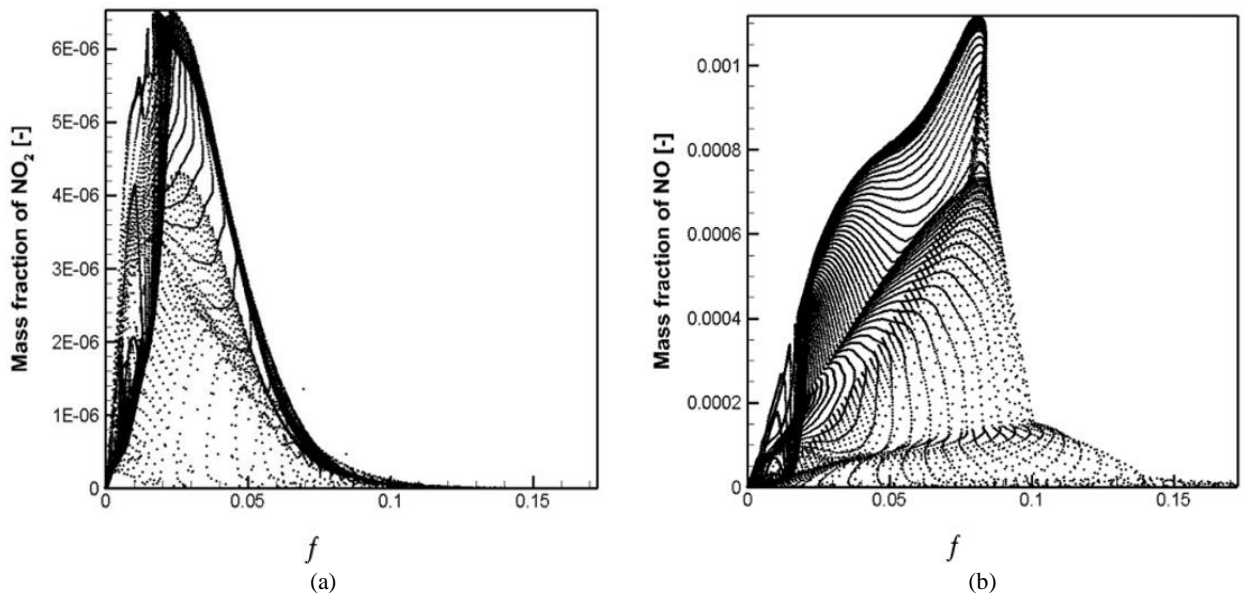
بعد از اطمینان از نتایج شبیه‌سازی، گسترش آلاینده اکسیدهای نیتروژن از راه شکل‌های پاششی^۳ اجزای ناکس در رابطه با نسبت مخلوط در شکل (۵) بررسی شد. این شکل حاکی از این امر است که بیشتر غلظت منوکسید نیتروژن در شعله مربوط به نسبت‌های مخلوط پایین است؛ هنگامی که هیدروکربن به‌طور کامل از بین رفته و مصرف می‌شوند. این گراف‌ها مبین این حقیقت است که تولید ناکس گرمایی محدود به نواحی بعد از شعله است، در جایی که غلظت نیتروژن هم‌چنان بالاست و می‌تواند با رادیکال‌های آزاد اکسیژن وارد واکنش شود. این نتایج هم‌خوان و معادل کارهای مشابه در بویلرهاست [۹].

محلی پایین است. بیشتر دی‌اکسید نیتروژن تولیدی از واکنش شیمیایی میان منوکسید نیتروژن و یون‌های هیدروکسی پروکسیل است. این امر زمانی رخ می‌دهد که شعله ناپدید شود و یا نزدیک خفه‌شدن^۱ باشد. شکل (۳) اثبات می‌کند که این اصول با تولید دی‌اکسید نیتروژن در نواحی اطراف شعله و دیواره‌ها منطبق است. صحت‌گذاری بر روی مدل در شکل (۴) آورده شده‌است که دقت مدل دینامیک سیالات محاسباتی در بیان مجموع منوکسید نیتروژن و دی‌اکسید نیتروژن را نمایش می‌دهد. از این رو شکل کلی شعاعی آلاینده منوکسید نیتروژن در فواصل محوری ۲۰، ۴۰، و ۶۰ سانتی‌متری و آلاینده دی‌اکسید نیتروژن در فواصل ۲۰ و ۴۰ سانتی‌متری از نازل سوخت تقریباً در مدل یکسان است. در فاصله محوری ۸۰ سانتی‌متری، در زمانی که شعله در آستانه ناپدید شدن است، این خودتشابهی^۲ در غلظت آلاینده منوکسید نیتروژن به‌طور کلی از بین خواهد رفت.



شکل ۴. نمایش شبیه‌سازی گسترش آلاینده اکسیدهای نیتروژن در جهت (a) شعاعی و (b) محوری در بویلر در مقایسه با داده‌های آزمایشگاهی.

Figure 4. The presentation of simulation of the NO_x pollutants emission in (a) radial and (b) axial directions in boiler in comparison with the experimental data.



شکل ۵. درصدهای جرمی (a) NO_2 و (b) NO برحسب ترکیب درصد جرمی نیتروژن در مخلوط گاز خروجی (f).

Figure 5. The mass fractions of (a) NO_2 and (b) NO in terms of N_2 fraction in gas mixture (f).

محاسباتی برای پیش‌گویی رفتار یک سامانه احتراق واقعی بحث شد. این مدل شامل مسیر تشکیل منوکسید نیتروژن از مسیر گرمایی و سازوکارهای جانبی اکسیدنیتروز^۲ است. تشکیل دی‌اکسید نیتروژن نیز در مدل لحاظ شد. این مقاله نشان می‌دهد که بررسی‌های بیشتر و یک بانک اطلاعاتی جامع در مورد احتراق بیودیزل مورد نیاز است. به‌خصوص معرفی و ارائه واکنش‌های تشکیل منوکسید نیتروژن از راه هیدروکربن‌ها و یا ناکس القایی یکی از زمینه‌هایی است که باید بیشتر مطالعه شود. این کمبود در ادبیات احتراق بیودیزل منجر به خطای ۲۰ تا ۳۰ درصدی در پیش‌گویی‌های این مقاله شد. این سوخت در آینده نزدیک، برای تأمین انرژی بشر نقش چشم‌گیری خواهد داشت. هنوز به تحقیق و تفحص بیشتری در زمینه آزمایشگاهی و مدل‌سازی سوخت بیودیزل نیاز است. یک چشم‌انداز قابل توجه در مورد انتقال تشکیل منوکسید نیتروژن گرمایی است از نواحی با بازه‌های زمانی بالا به نواحی که در آن سوخت و هوا در حال مخلوط‌شدن و واکنش‌کردن هستند. این عمل باعث بالارفتن کیفیت احتراق سوخت بیودیزل و افزایش انتقال گرمای در سامانه‌های احتراق می‌شود.

۵. نتیجه‌گیری

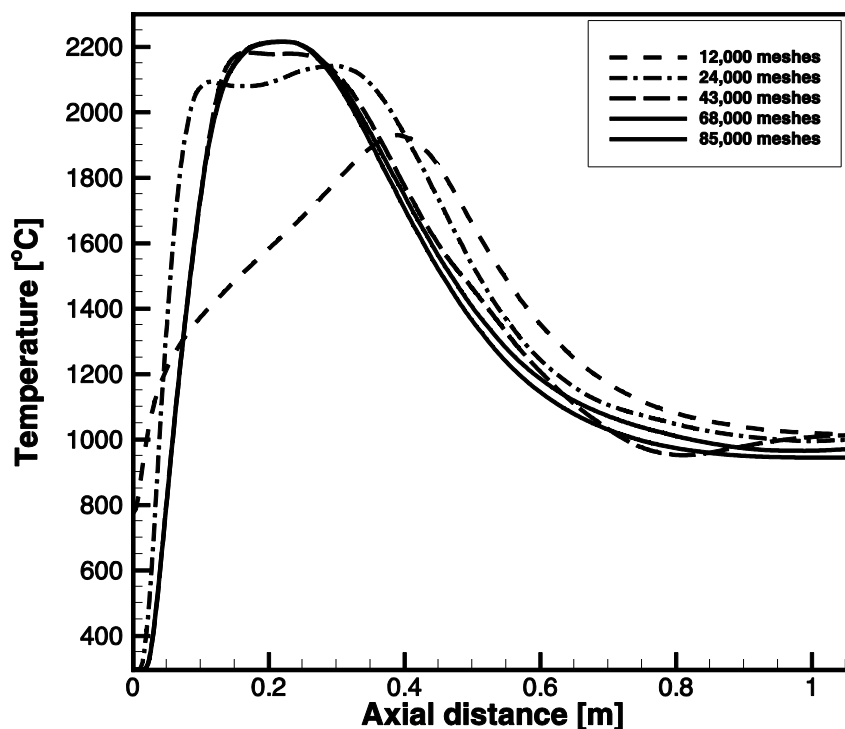
تشکیل ناکس در شعله آشفته بیودیزل در یک مشعل آزمایشگاهی مدل و از راه آزمایشگاهی صحت‌سنجی شد. انتخاب مدل فیزیکی، احتراق، ساده‌سازی‌ها، تشعشع، مدل هندسی، خطی‌سازی معادلات دیفرانسیل، شرایط مرزی، نوع و الگوریتم حل معادلات دقت قابل قبولی در محاسبه آلاینده منوکسید نیتروژن دارد. سازوکار احتراق به‌کار گرفته‌شده، ساده و کاهش‌یافته سازوکارهای تدوین‌شده برای احتراق بیودیزل است. این سازوکار شامل تشکیل مواد جانبی و از هم‌گسستن رادیکال‌های آزاد مهم در احتراق بیودیزل است. این مدل در بیان دمای پیک شعله و غلظت آلاینده منوکسید نیتروژن دقت قابل قبولی از خود داشت. این مدل دارای پیش‌گویی خوبی برای محاسبه آلاینده اکسیدهای نیتروژن در نواحی بعد از مرزهای شعله نیست. این امر به‌علت انتخاب مدل برهم‌کنش آشفته‌گی - شیمی^۱ در محاسبه تعادل احتراق بود. مدل تشعشع برای افزایش دقت مدل در پیش‌گویی و بیان آلاینده ناکس ضروری است. نتایج این شبهه‌سازی نشان داد که در صورت در نظر نگرفتن مدل تشعشع، دقت محاسبات در تعیین آلاینده ناکس کاهش می‌یابد.

به‌طور خلاصه، این مقاله شامل یک مدل بر مبنای دینامیک سیالات محاسباتی برای تخمین آلاینده ناکس بود. از توانایی این روش

2. N_2O pathway Mechanism

1. Turbulence-Chemistry Interaction

ضمیمه الف
نتایج استقلال از مش



شکل الف-۱. نتایج دمای محوری در محفظه احتراق بویلر برای تعداد مختلف عناصر در شبکه ایجاد شده برای دامنه محاسباتی.

Figure A-1. Axial temperature of the boiler combustion chamber for different elements in the computational domain.

مراجع

- [1] Yazdani Motlagh T & N Azadani L. (2022). Effect of Triangular Injection Rate Shape on the Performance of a Reactivity Controlled Compression Ignition Engine. *Iranian Chemical Engineering Journal*. 21: 24-34.
- [2] Raeisi A. N, Mostoufi N & Soleimani M. (2023). Determining the Tail Gas Analyzer Control Loop Equations for Required Air Flow Adjustment in Sulfur Recovery Unit. *Iranian Chemical Engineering Journal*. 22: 55-65.
- [3] Darabkhani H. G, Varasteh H & Bazooyar B. (2023) Carbon Capture Technologies for Gas-Turbine-Based Power Plants. First edition, Elsevier.
- [4] Boardman R. D & Douglas Smoot L. (1988). Prediction of nitric oxide in advanced combustion systems. *AIChE Journal*. 34: 1573-1576.
- [5] Hill S. C & Smoot L. D. (2000). Modeling of nitrogen oxides formation and destruction in combustion systems. *Progress in Energy and Combustion Science*. 26: 417-458.
- [6] Alzaharnah I., Habib M. A., Elshafei M. & Ahmed P. (2013). Control of the boiler swing rate for NO emission minimization. *Energy and Fuels*. 27: 6079-6086.
- [7] Ferretti G. & Piroddi L. (2001). Estimation of NOx emissions in thermal power plants using neural networks. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*. 123: 465-471.
- [8] Pallarés J., Arauzo I. & Williams A. (2007). Integration of CFD codes and advanced combustion models for quantitative burnout determination. *Fuel*. 86: 2283-2290.
- [9] Bazooyar B., Coomson G., Manovic V. & Nabavi S. A. (2023). Comparative analysis of ammonia combustion for domestic applications. *Journal of Energy Institute*. 106: 101130-101142.
- [10] Mazidi Sharfabadi M., Ayazi M. & Sari M. (2020). Two-Phase Flow Analysis in the Recirculation Region of a Gas Turbine Combustion Chamber by Changing Effective Geometrical Parameters. *Iranian Chemical Engineering Journal*. 18: 28-45.

- [11] Entezari B., Kazemeyni M. & Karami M. (2018). An Investigation on Appropriate Procedure for Micro-Reactor Fabrication & Simulation. *Iranian Chemical Engineering Journal*. 17: 20-29.
- [12] Bazooyar B. & Gohari Darabkhani H. (2020). Design, manufacture and test of a micro-turbine renewable energy combustor. *Energy Conversion and Management*. 213 8:112782-112793.
- [13] Bazooyar B. & Gohari Darabkhani H. (2021). The design strategy and testing of an efficient microgas turbine combustor for biogas fuel. *Fuel*. 294:120535-120543.
- [14] Bazooyar B., Zhu M., Manovic V. & Nabavi S. A. (2023). Direct Numerical Simulation (DNS) of packed and monolith Syngas Catalytic Combustors for Micro Electrical Mechanical Systems (MEMS). *Energy Conversion and Management*. Pre Proof. <https://doi.org/10.1016/j.ecmx.2023.100422>.
- [15] Bazooyar B. & Darabkhani H. G. (2019). Design and numerical analysis of a 3 kWe flameless microturbine combustor for hydrogen fuel. *International Journal of Hydrogen Energy*. 44: 11134–11144.
- [16] Bazooyar B., Ebrahimzadeh E., Jomekian A. & Shariati A. (2014). NO_x formation of biodiesel in utility power plant boilers. part a: Influence of fuel characteristics. *Energy and Fuels*. 28: 3778–3792.
- [17] Fisher E. M., Pitz W. J., Curran H. J. & Westbrook CK. (2000). Detailed chemical kinetic mechanisms for combustion of oxygenated fuels. *Proceedings of the Combustion Institute*. 28: 1579–1586.
- [18] Brakora J. & Reitz R. (2013) A comprehensive combustion model for biodiesel-fueled engine simulations. *SAE Technical Papers*. 1: 1099-1119.
- [19] Bulat G., Jones W. P. & Marquis A. J. (2014) NO and CO formation in an industrial gas-turbine combustion chamber using LES with the Eulerian sub-grid PDF method. *Combustion and Flame*. 161: 1804–1825.
- [20] Lai J. Y. W., Lin K. C. & Violi A. (2011). Biodiesel combustion: Advances in chemical kinetic modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*. 37: 1–14.
- [21] Macor A. & Pavanello P. (2009). Performance and emissions of biodiesel in a boiler for residential heating. *Energy*. 34: 2025–2032.
- [22] Bazooyar B., Ghorbani A. & Shariati A. (2011). Combustion performance and emissions of petrodiesel and biodiesels based on various vegetable oils in a semi industrial boiler. *Fuel*. 90: 3078–3092.
- [23] Barnes C. D., Garwood D. R. & Price T. J. (2010). The use of biodiesel blends in domestic vaporising oil burners. *Energy*. 35:501–505.
- [24] Bazooyar B., Shariati A. & Hashemabadi S. H. (2015). Economy of a utility boiler power plant fueled with vegetable oil, biodiesel, petrodiesel and their prevalent blends. *Sustainable Production and Consumption*. 3: 1–7.
- [25] Bazooyar B., Hashemabadi S. H. & Shariati A. (2016). NO_x formation of biodiesel in utility power plant boilers; Part B. Comparison of NO between biodiesel and petrodiesel. *Fuel*. 182: 323–332.
- [26] Dixit S., Kumar A., Kumar S., Waghmare N., Thaku H. C. & Khan S. (2019). CFD analysis of biodiesel blends and combustion using Ansys Fluent. *Material Today Proceedings*. 26: 665–670.
- [27] Pereira C., Wang G. & Costa M. (2014). Combustion of biodiesel in a large-scale laboratory furnace. *Energy*. 74: 950–955.
- [28] Glaude P. A., Fournet R., Bounaceur R. & Moliere M. (2009). Gas turbines and biodiesel: A clarification of the relative NO_x indices of fame, gasoil and natural gas. *Turbomachinery Technical Conference and Exposition*. 1: 419–425.
- [29] Cundari L., Komariah L. N., Novia, Maretha I. & Septiana L. (2016). Temperature distribution of biodiesel blends combustion in boiler using CFD-fluent. *International Journal on Advanced Science, Engineering and Information Technology*. 6: 120-127.
- [30] Shaahmadi F., Anbaz M. A & Bazooyar B. (2017) Analysis of intelligent models in prediction nitrous oxide (N₂O) solubility in ionic liquids (ILs). *Journal of Molecular Liquids*. 246: 48–57.
- [31] Collazo J., Porteiro J., Patiño D., Miguez J. L., Granada E. & Moran J. (2009). Simulation and experimental validation of a methanol burner. *Fuel*. 88: 326–334.
- [32] Bazooyar B., Shariati A. & Hashemabadi S. H. (2016). Turbulent Non-premixed Combustion of Rapeseed Methyl Ester in a Free Shear Swirl Air Flow. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. 55: 11645–11663.
- [33] Bazooyar B., Hosseini S. Y, Moradi Ghoje Begloo S, Shariati A, Hashemabadi S. H & Shaahmadi F. (2018). Mixed modified Fe₂O₃-WO₃ as new fuel borne catalyst (FBC) for biodiesel fuel. *Energy*. 149: 438–453.
- [34] Senecal P. K., Schmidt D. P., Nouar I, Rutland C. J., Reitz R. D. & Corradini M. L. (1999). Modeling high-speed viscous liquid sheet atomization. *International Journal of Multiphase Flow*. 25: 1073-1097.
- [35] Wang H. & Chen Y. (2004). PDF modelling of turbulent non-premixed combustion with detailed chemistry. *Chemical Engineering Science*. 59: 3477-3490.
- [36] Menter F. R. (1994). Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal*. 32: 1598–1605.

- [37] Bazooyar B., Jomekian A. & Shariati A. (2017). Analysis of the Formation and Interaction of Nitrogen Oxides in a Rapeseed Methyl Ester Nonpremixed Turbulent Flame. *Energy and Fuels*. 31: 8708–8721.
- [38] Selçuk N. & Kayakol N. (1997). Evaluation of discrete ordinates method for radiative transfer in rectangular furnaces. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 40: 213–222.
- [39] Golovitchev V. I. & Yang J. (2009). Construction of combustion models for rapeseed methyl ester biodiesel fuel for internal combustion engine applications. *Biotechnology Advances*. 27: 641-655.
- [40] Peters N. (1988). Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. *Symposium (International) on Combustion*. 21: 1231–1250.
- [41] Peters N. (1984). Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*. 10: 319–339.
- [42] Bazooyar B. & Shariati A. (2013). A comparison of the emission and thermal capacity of methyl ester of corn oil with diesel in an experimental boiler. *Energy Sources, Part A Recover Util Environ Eff*. 35: 1618–1628.
- [43] Bazooyar B., Ghorbani A. & Shariati A. (2015). Physical properties of methyl esters made from alkali-based transesterification and conventional diesel fuel. *Energy Sources, Part A Recovery, Utilization, and Environmental Effects*. 37: 468–476.
- [44] Bazooyar B., Hallajbashi N., Shariati A. & Ghorbani A. (2014). An investigation of the effect of input air upon combustion performance and emissions of biodiesel and diesel fuel in an experimental boiler. *Energy Sources, Part A Recovery, Utilization, and Environmental Effects*. 36: 383–392.
- [45] Ghorbani A. & Bazooyar B. (2012). Optimization of the combustion of SOME (soybean oil methyl ester), B5, B10, B20 and petrodiesel in a semi-industrial boiler. *Energy*. 44: 217–227.
- [46] Ghorbani A., Bazooyar B., Shariati A., Jokar S. M., Ajami H. & Naderi A. (2011). A comparative study of combustion performance and emission of biodiesel blends and diesel in an experimental boiler. *Applied Energy*. 88: 4725–4732.
- [47] Bazooyar B., Shaahmadi F., Anbaz M. A. & Jomekian A. (2021). Intelligent modelling and analysis of biodiesel/alcohol/glycerol liquid-liquid equilibria. *Journal of Molecular Liquids*. 322: 114972:114984.
- [48] Olikara C. & Borman G. L. (1975). A computer program for calculating properties of equilibrium combustion products with some applications to I.C. engines. *SAE Technical Paper*. 1: 750468-750491.
- [49] Bazooyar B., Shariati A. & Hashemabadi S. H. (2015). Characterization and Reduction of NO during the Combustion of Biodiesel in a Semi-industrial Boiler. *Energy and Fuels*. 29: 6804–6814.
- [50] Bazooyar B., Shariati A., Khosravi-Nikou M. & Hashemabadi S. H. (2019). Numerical analysis of nitrogen oxides in turbulent lifted H₂/N₂ cobra jet flame issuing into a vitiated coflow. *International Journal Hydrogen Energy*. 44: 13932–13952.
- [51] Bazooyar B. & Darabkhani H. G. (2019). Design procedure and performance analysis of a microturbine combustor working on biogas for power generation. *Turbomachinery Technical Conference and Exposition. Volume 4B: Combustion, Fuels, and Emissions*. <https://doi.org/10.1115/GT2019-91052>.
- [52] Bazooyar B. & Gohari Darabkhani H. (2019). Analysis of flame stabilization to a thermo-photovoltaic micro-combustor step in turbulent premixed hydrogen flame. *Fuel*. 257: 115989-115999.
- [53] Bazooyar B., Jomekian A., Karimi-Sibaki E., Habibi M. & Gohari Darabkhani H. (2019). The role of heat recirculation and flame stabilization in the formation of NOX in a thermo-photovoltaic micro-combustor step wall. *International Journal of Hydrogen Energy*. 44: 26012–26027.