

الگوسازی تصادفی اثر اختلاط مولکولی غیر کامل بر احتراق پیش آمیخته هیدروژن

محمدعلی سرودی^۱، عباس فخر طباطبایی^۲

تهران، مرکز تحقیقات فناوری پیشرانس، صندوق پستی 14155-7811
masoroudi@yahoo.com

چکیده

در این مقاله اثر اختلاط مولکولی غیر کامل بر احتراق پیش آمیخته هیدروژن مورد مطالعه قرار گرفته است. بدین منظور الگوسازی تصادفی یک رآکتور آمیخته جزئی یا PaSR (partially-stirred reactor) با استفاده از دو مدل اختلاط کرل (Curl) و تخمین میانگین مجذور خطی یا LMSE (linear mean square estimation) صورت پذیرفته و خروجی‌های مدل با نتایج شبیه‌سازی گذرای رآکتور کاملاً آمیخته یا PSR (perfectly-stirred reactor) مقایسه شده است. برای توصیف پدیده‌های شیمیایی از مکانیزمی مشتمل بر 18 گونه شیمیایی و 68 واکنش بنیادی استفاده گردیده است. نتایج مطالعات حاکی از اثر چشمگیر اختلاط مولکولی ناقص بر میزان اکسیدهای نیتروژن ناشی از احتراق هیدروژن بوده است.

واژه‌های کلیدی: رآکتور آمیخته جزئی - الگوسازی تصادفی - اختلاط مولکولی - احتراق پیش آمیخته.

1- مقدمه

رآکتور کاملاً آمیخته (PSR) به طور گسترده‌ای در مطالعه پدیده‌های احتراقی تحت کنترل سینتیک شیمیایی به کار گرفته شده و همچنان یکی از ارزشمندترین ابزار توسعه، ارزیابی و ساده‌سازی مکانیزم‌های سینتیک شیمیایی به حساب می‌آید [1]. این رآکتور متشکل از یک محفظه کوچک و مجراهای ورودی و خروجی بوده و شدت اختلاط آشفته به نحوی است که مخلوط درون رآکتور همواره ماهیتی کاملاً آمیخته دارد. در نتیجه این شرایط کاملاً آمیخته، نرخ فرآیندهای شیمیایی تحت کنترل سینتیک شیمیایی و مستقل از فرآیند اختلاط بوده و زمان اقامت مواد واکنشی درون رآکتور تنها مقیاس زمانی کنترل کننده رفتار رآکتور خواهد بود [2]. با وجود آن که PSR می‌تواند بینشی قوی در حوزه سینتیک شیمیایی ایجاد نماید ولیکن در بسیاری از موارد کاربردی شرایط به نحو چشمگیری از شرایط کاملاً آمیخته فاصله می‌گیرد. در شرایطی که نرخ اختلاط آشفته در مقایسه با سینتیک شیمیایی سریع نباشد، میزان اختلاط می‌تواند نقشی عمده در ویژگی‌های احتراق ایفا نماید. به همین دلیل شبیه‌سازی رآکتور آمیخته جزئی (PaSR) به عنوان روشی برای ارزیابی آثار ماهیت اختلاط ناقص بر خواص ترموشیمیایی درون رآکتور پیشنهاد شده است [3].

یکی از مسائل مهم در مطالعه شعله‌های آشفته بحث همگیری بین واکنش‌های شیمیایی و آشفستگی بوده و این تعامل را می‌توان به بهترین نحو با استفاده از عدد بی بعد دامکهلر (Damköhler) توصیف نمود (نسبت زمان مشخصه جریان به زمان مشخصه واکنش شیمیایی). به دلیل طیف وسیع مقیاس‌های زمانی پدیده‌های شیمیایی در یک سیستم چندجزئی، عدد

1- کارشناس ارشد پیشرانس

2- کارشناس ارشد پیشرانس

دامکهلر نیز می‌تواند در یک طیف وسیع گسترش یابد. در صورتی که عدد دامکهلر مربوط به یک واکنش شیمیایی ویژه به سمت بی‌نهایت میل نماید، واکنش مزبور بسیار سریع‌تر به جریان پاسخ داده و لذا به شرایط تعادل (equilibrium) می‌رسد. از سوی دیگر اگر عدد دامکهلر یک واکنش به سمت صفر میل نماید، می‌توان فرض شیمی تثبیت شده (frozen) را برای آن اعمال نمود. تنها در شرایطی که عدد دامکهلر از مرتبه واحد باشد، شیمی نرخ محدود (finite-rate) اهمیت یافته و همچنین تعامل بین واکنش‌های شیمیایی و دینامیک شاره قوت خواهد یافت. با استفاده از مدل PaSR می‌توان تعامل بین واکنش‌های شیمیایی و آشفستگی را نیز به صورت کمی مطالعه نمود [3و4].

در این مطالعه اثر اختلاط مولکولی غیر کامل بر احتراق پیش‌آمیخته هیدروژن و هوا با استفاده از مدل PaSR مورد مطالعه قرار گرفته است. بدین منظور الگوسازی تصادفی رآکتور آمیخته جزئی با استفاده از دو مدل اختلاط پیراسته کرل و تخمین میانگین مجذور خطی (LMSE) یا IEM (interaction by exchange with the mean) و مکانیزم سینتیک شیمیایی کامل احتراق هیدروژن صورت پذیرفته است. برای بررسی اثر اختلاط ناقص بر رفتار احتراق پیش‌آمیخته، خروجی‌های مدل مزبور با نتایج شبیه‌سازی گذرای رآکتور کاملاً آمیخته مقایسه شده است. در قسمت‌های آتی این متن ابتدا محاسبات سینتیک شیمیایی مورد استفاده معرفی شده است. سپس رآکتورهای PSR و PaSR و فرمولاسیون حاکم بر آنها تشریح گردیده و در انتها نیز نتایج عددی محاسبات هر دو مدل ارائه و مقایسه شده است.

2- سینتیک شیمیایی

در این مطالعه از نسخه سوم مکانیزم بهینه جی‌آرای (GRI3.0) [5] برای توصیف احتراق هیدروژن و هوا استفاده شده که مشتمل بر 325 واکنش بنیادی و 53 گونه شیمیایی می‌باشد. مکانیزم مزبور برای احتراق متان بهینه‌سازی شده و با توجه به کاربرد ویژه این مطالعه (احتراق هیدروژن و هوا) زیرمجموعه‌ای شامل 18 گونه شیمیایی و 68 واکنش بنیادی از این مکانیزم در محاسبات لحاظ گردیده است. گونه‌های شیمیایی مورد استفاده در این مکانیزم جدید در جدول (1) ارائه شده است.

جدول 1- گونه‌های در نظر گرفته شده در مکانیزم شیمیایی

H ₂	O ₂	HO ₂	NH	NNH	N ₂ O
H	OH	H ₂ O ₂	NH ₂	NO	HNO
O	H ₂ O	N	NH ₃	NO ₂	N ₂

فرم کلی واکنش‌های مکانیزم سینتیک شیمیایی را می‌توان به فرم زیر بیان نمود که Γ_i و N_r بترتیب معرف فرمول شیمیایی گونه i ام و تعداد واکنش‌های بنیادی می‌باشد [2]:

$$\sum_{i=1}^{N_s} v'_{ij} \Gamma_i \leftrightarrow \sum_{i=1}^{N_s} v''_{ij} \Gamma_i \quad , j=1..N_r \quad (1)$$

در واکنش‌های یک‌طرفه حالت برگشت معادله فوق حذف می‌شود. در رابطه فوق v'_{ij} و v''_{ij} بترتیب بیانگر ضرایب استوکیومتری ماده اولیه و محصول i ام در واکنش j ام و N_s بیانگر تعداد گونه‌های شیمیایی می‌باشد. در صورتی که ضرایب نرخ واکنش‌های پیشرو و پسرو برای واکنش j ام به ترتیب با k_{ff} و k_{bj} نمایش داده شود، متغیر پیشرفت واکنش j ام یا q_j به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$q_j = [M]_j \left(k_{ff} \prod_{i=1}^{N_s} C_i^{v'_{ij}} - k_{bj} \prod_{i=1}^{N_s} C_i^{v''_{ij}} \right) \quad (2)$$

در رابطه فوق C_i معرف غلظت گونه شیمیایی i ام می‌باشد. در صورتی که جسم سوم (third body) در واکنشی حضور نداشته باشد، غلظت آن یا $[M]_j$ برابر واحد فرض می‌شود. در صورتی که همه گونه‌های شیمیایی به نحوی یکسان به عنوان

جسم سوم در مکانیزم حضور یابند، غلظت جسم سوم برابر مجموع غلظت‌های همه گونه‌های شیمیایی خواهد بود. در عمل راندمانی به عنوان راندمان افزوده (enhanced efficiency) برای گونه‌های شیمیایی تعریف می‌شود که بیانگر نسبت حضور آنها به عنوان جسم سوم در واکنش‌های مربوطه است. مقدار غلظت جسم سوم در واکنش Z ام به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$[M]_j = \sum_{i=1}^{N_s} \alpha_{ij} C_i \quad (3)$$

در رابطه فوق α_{ij} بیانگر راندمان افزوده گونه شیمیایی i ام به عنوان جسم سوم در واکنش Z ام بوده و مقدار آن همواره واحد فرض می‌شود مگر این که خلاف آن در اطلاعات مکانیزم مورد استفاده تصریح شده باشد. در نهایت نرخ تولید خالص مولی گونه شیمیایی i ام یا ω_i از رابطه زیر محاسبه می‌گردد که در آن $v_{ij} = v_{ij}'' - v_{ij}'$:

$$\omega_i = \sum_{j=1}^{N_r} v_{ij} q_j \quad (4)$$

برای تکمیل محاسبات، کفایت که مقادیر k_{ff} و k_{bj} در رابطه (2) برای تمام واکنش‌ها محاسبه گردد. در واکنش‌های مستقل از فشار می‌توان مقدار k_{ff} را از رابطه زیر محاسبه نمود:

$$k_{ff} = \alpha_j T^{\beta_j} \exp\left(\frac{-E_j}{R_u T}\right) \quad (5)$$

در رابطه فوق α_j ، β_j و E_j ثوابت آرنیوسی بوده و مقادیر آنها در اطلاعات مکانیزم شیمیایی موجود می‌باشد. همچنین T و R_u نیز به ترتیب بیانگر دما و ثابت جهانی گازها می‌باشد. برای واکنش‌های وابسته به فشار تنزلی (fall-off)، که در این مطالعه شامل تمام انواع واکنش‌های وابسته به فشار می‌شود، k_{ff} برحسب $k_{\infty j}$ (ضریب نرخ واکنش در محدوده فشار بالا) به صورت زیر قابل بیان است:

(6)

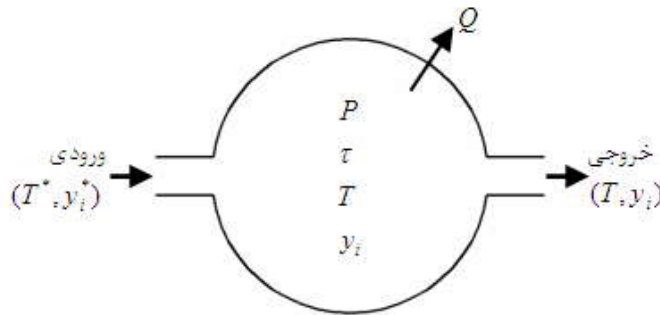
$$k_{ff} = k_{\infty j} \left(\frac{\text{Pr}_j}{1 + \text{Pr}_j} \right) F_j$$

در رابطه فوق Pr_j و F_j به ترتیب معرف فشار کاهشده و فاکتور توسعه (broadening factor) واکنش Z ام می‌باشد. پارامتر $k_{\infty j}$ نیز به فرم معادله (5) قابل بیان بوده و ثوابت آن در اطلاعات مکانیزم شیمیایی ارائه شده است. مقدار فشار کاهشده نیز از رابطه $\text{Pr}_j = k_{0j} [M]_j / k_{\infty j}$ قابل محاسبه است که k_{0j} معرف ضریب نرخ واکنش در محدوده فشار پایین می‌باشد. برای مطالعه وابستگی فشاری واکنش‌های بنیادی مدل‌های مختلفی ارائه شده است که تفاوت آنها در نحوه محاسبه فاکتور توسعه می‌باشد. به عنوان مثال در فرم لیندمان (Lindemann) مقدار فاکتور مزبور برابر واحد است. وابستگی فشاری واکنش‌های شیمیایی را می‌توان به فرم‌های دیگری نیز بیان نمود [6]. با معلوم شدن k_{ff} برای تمام واکنش‌ها می‌توان مقادیر k_{bj} را نیز با استفاده از اطلاعات ترمودینامیکی و به کمک رابطه زیر برای تمام واکنش‌های دوطرفه محاسبه نمود که در این رابطه P معرف فشار بوده، و همچنین H_i و S_i^o به ترتیب بیانگر انتالپی و انتروپی ویژه مولی گونه شیمیایی i ام می‌باشند. علامت o نیز نشانگر شرایط فشار استاندارد است:

$$k_{bj} = k_{ff} \left(\frac{P^o}{R_u T} \right)^{-\sum_{i=1}^{N_s} \nu_{ji}} \exp\left(\sum_{i=1}^{N_s} \nu_{ij} \left(\frac{H_i}{R_u T} - \frac{S_i^o}{R_u} \right) \right) \quad (7)$$

3- رآکتور کاملاً آمیخته

شما تیکی از رآکتور کاملاً آمیخته در شکل (1) نمایش داده شده است. همانگونه که پیشتر نیز اشاره گردید، فرض می‌شود که پروسه اختلاط مواد واکنشی در محفظه رآکتور به صورت بی‌نهایت سریع صورت گرفته و لذا همواره محتوای درون آن همگن است. به عبارت دیگر تنها مقیاس زمانی حاکم بر مساله مربوط به نرخ واکنشهای شیمیایی خواهد بود. مدلسازی عددی این رآکتور اولین بار توسط گلاربورگ (Glarborg) و همکارانش صورت گرفته است [7]. ویرایش جدید این کد با قابلیت شبیه‌سازی واکنش‌های سطح و جریان‌های پلازما تحت عنوان کد AURORA [8]، امروزه یکی از مولفه‌های اصلی بسته نرم‌افزاری CHEMKIN می‌باشد.



شکل 1- نمای شما تیک رآکتور کاملاً آمیخته

رآکتور کاملاً آمیخته از یک سو به دلیل سادگی معادلات حاکم و از سوی دیگر بخاطر نوع خاص فیزیک حاکم بر آن مدلی پرکاربرد بوده و از آن در توسعه مکانیزم‌های سینتیک شیمیایی، بررسی تشکیل اکسیدهای نیتروژن، مدلسازی ناحیه ابتدایی در محفظه احتراق موتورهای توربینی، شبیه‌سازی شعله‌های آشفته پیش آمیخته و پیش‌نامیخته، مطالعه پایداری شعله و کاربردهای دیگر به وفور استفاده شده است [1]. معادلات بقای گونه‌های شیمیایی و انرژی حاکم بر رآکتور کاملاً آمیخته بی‌دررو ($Q=0$) و فشار- ثابت در حالت ناپایا را می‌توان به راحتی به صورت روابط (8) و (9) بیان نمود [9]. در روابط مزبور ρ ، W_i ، Y_i ، τ_{res} به ترتیب معرف کسر جرمی و وزن مولکولی گونه شیمیایی i ام، دانسیته مخلوط و زمان اقامت متوسط رآکتور می‌باشند. پارامتر اخیر به صورت $\tau_{res} = \rho V / \dot{m}$ تعریف می‌شود که در آن V و \dot{m} به ترتیب بیانگر حجم رآکتور و دبی جرمی بوده و علامت * نیز نشانگر شرایط ورودی است. همچنین در این روابط \bar{c}_p و h_i نیز به ترتیب معرف گرمای ویژه جرمی فشار- ثابت مخلوط و انتالپی ویژه جرمی گونه شیمیایی i ام می‌باشد.

$$\frac{dY_i}{dt} = \frac{1}{\tau_{res}} (Y_i^* - Y_i) + \frac{W_i \dot{\omega}_i}{\rho} \quad , \quad i = 1..N_s \quad (8)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\bar{c}_p \tau_{res}} \sum_{i=1}^{N_s} Y_i^* (h_i^* - h_i) - \sum_{i=1}^{N_s} \frac{W_i \dot{\omega}_i h_i}{\rho \bar{c}_p} \quad (9)$$

4- رآکتور آمیخته جزئی

همانگونه که در قسمت‌های قبل نیز اشاره گردید، استفاده از مدل PaSR امکان محک زدن فرض اختلاط آشفته بسیار سریع را فراهم می‌سازد. در مدل PaSR فرض بر آن است که خواص ترموشیمیایی متوسط درون رآکتور از نظر مکانی همگن بوده ولیکن اختلاط مولکولی به صورت ناقص انجام شده است (به بیان دیگر مواد واکنشی به طور کامل در سطح مولکولی در یکدیگر نفوذ نکرده‌اند ولی مقادیر متوسط آنها درون رآکتور به واسطه اختلاط آشفته یکنواخت شده است). فرآیند اختلاط درون PaSR به وسیله فرکانس اختلاط مشخص می‌گردد که این پارامتر عموماً به صورت معکوس مقیاس زمانی آشفستگی تعریف می‌گردد. از آنجایی که دینامیک جریان درون PaSR به طور مستقیم مورد مطالعه قرار نمی‌گیرد، لذا فرکانس اختلاط به عنوان

سنجهای از شدت آشفته‌گی به عنوان ورودی مدل در نظر گرفته می‌شود و به کمک آن می‌توان اثر کنترلی جریان بر گستره اختلاط مولکولی و لذا واکنش‌های شیمیایی را مطالعه نمود. بنابراین علاوه بر زمان اقامت متوسط رآکتور (که تنها مقیاس زمانی حاکم بر مدل PSR می‌باشد)، زمان اختلاط نیز مقیاس زمانی سیالاتی دیگری است که ویژگی‌های PaSR را کنترل می‌نماید. مقیاس زمانی اختلاط (τ_{mix}) متناسب با نسبت انرژی جنبشی آشفته به نرخ اضمحلال آن تعریف می‌گردد. ترکیب شیمیایی و دمای درون PaSR به وسیله یک تابع دانسیته احتمال یا PDF (probability density function) توصیف می‌گردد. با فرض همگن بودن مکانی میدان جریان درون رآکتور و صرفنظر از اغتشاشات سرعت، PDF ترکیب شیمیایی زیرمجموعه‌ای از PDF مشترک سرعت- ترکیب شیمیایی بوده و تنها بر روی کمیت‌های اسکالرها تعریف خواهد شد (البته برخلاف حالت PSR در این رآکتور PDF یک تابع دلتا در فضای اسکالر نیست چرا که مواد واکنشی، مواد میانی و محصولات در سطح مولکولی مخلوط نشده‌اند). در صورتی که مقیاس زمانی اختلاط به سمت صفر میل نماید، فرآیند اختلاط تشدید شده و PaSR عملاً مانند PSR رفتار خواهد نمود. در این حالت PDF اسکالر مشترک تبدیل به یک تابع دلتا در فضای اسکالر شده و تنها مقیاس زمانی کنترل‌کننده مساله، زمان اقامت متوسط رآکتور خواهد بود. می‌توان نشان داد که در محدوده مقیاس‌های اختلاط نسبتاً بالا مدل PaSR به رآکتور پلاگ یا PFR (plug-flow reactor) میل می‌نماید [3و4]. ذیلا جزئیات فرمولاسیون حاکم بر مدل رآکتور آمیخته جزئی مورد بررسی قرار می‌گیرد.

4-1- تابع دانسیته احتمال

با استفاده از ایده تابع دانسیته احتمال مشترک اسکالرها (joint probability density function of scalars) می‌توان توصیف آماری کاملی از حالت ترمودینامیکی و شیمیایی سیستم مورد مطالعه به دست آورد. با استفاده از یک معادله انتقال برای تابع مزبور می‌توان اثر واکنش‌های شیمیایی در میدان جریان واکنشی را بدون توجه به پیچیدگی و غیر خطی بودن مکانیزم‌های شیمیایی، به فرم بسته (closed form) مورد مطالعه قرار داد. متأسفانه جریان‌های واکنشی کاربردی عموماً دارای تعداد زیادی از متغیرها می‌باشند و لذا ابعاد تابع دانسیته احتمال $P_{\phi}(\psi_1, \dots, \psi_{\sigma}; \bar{x}, t)$ چندان بزرگ است که تحلیل‌های عددی تفاضل محدود متعارف برای معادله انتقال PDF غیر عملی می‌باشد (به دلیل مقدار بزرگ σ). در چنین مواردی می‌توان به جای بررسی صریح تابع دانسیته احتمال مورد بحث، از الگوریتم مونت کارلوی (Monte Carlo) پیشنهادی پوپ (Pope) برای حل معادله انتقال PDF استفاده نمود [10]. همچنین می‌توان نشان داد که معادله انتقال PDF به صورت زیر قابل بیان می‌باشد که جزئیات نحوه استخراج این معادله به طور کامل در مراجع [3و11] ارائه شده است.

$$\frac{\partial \tilde{P}_{\phi}(\bar{\psi}, t)}{\partial t} = - \sum_{\alpha=1}^K \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} \left\{ S_{\alpha}(\bar{\psi}) \tilde{P}_{\phi}(\bar{\psi}, t) \right\} + \frac{1}{\tau_{res}} \left\{ \tilde{P}_{\phi, i}(\bar{\psi}) - \tilde{P}_{\phi}(\bar{\psi}, t) \right\} - \sum_{\alpha=1, \beta=1}^K \frac{\partial^2}{\partial \psi_{\alpha} \partial \psi_{\beta}} \left\{ \epsilon_{\alpha\beta} \tilde{P}_{\phi}(\bar{\psi}, t) \right\} \quad (10)$$

دو عبارت اول سمت راست معادله (10) به ترتیب بیانگر اثر واکنش‌های شیمیایی و جریان بر تابع دانسیته احتمال بوده و عبارت آخر نیز بیانگر اثر اختلاط مولکولی می‌باشد و برای محاسبه آن نیاز به استفاده از یک الگوی اختلاط خواهد بود. این الگو، اختلاط نرخ محدود ذرات را در شبیه‌سازی تصادفی مدل می‌نماید. دو نمونه از مدل‌های اختلاط متعارف در این مطالعه مورد استفاده قرار گرفته است که این دو مدل در قسمت بعد معرفی می‌گردند. با استفاده از روش مونت کارلو و یک PDF اسکالر به همراه مدل اختلاط مناسب می‌توان شبیه‌سازی رآکتور آمیخته جزئی را با استفاده از مکانیزم‌های سینتیک شیمیایی کامل و در زمان معقول به انجام رساند.

4-2- اختلاط مولکولی

در این مطالعه مدل اختلاط پیراسته Curl [12] و مدل اختلاط LSME یا IEM [3و13] مورد استفاده قرار گرفته است. در این قسمت به طور خلاصه تنها به ارائه عبارات مربوط به دو مدل مزبور اکتفا شده و برای توضیحات بیشتر مطالعه مراجع [12و13] توصیه می‌گردد. روابط (11) و (12) به ترتیب بیانگر مدل‌های اختلاط پیراسته Curl و LMSE می‌باشد.

(11)

$$- \sum_{\alpha=1, \beta=1}^K \frac{\partial^2}{\partial \psi_\alpha \partial \psi_\beta} \left\langle \varepsilon_{\alpha\beta} | \bar{\phi} = \bar{\psi} \right\rangle \tilde{P}_{\bar{\phi}}(\bar{\psi}, t) = \frac{1}{\tau_{mix}} \left\{ \int \int \tilde{P}_{\bar{\phi}}(\psi', t) \tilde{P}_{\bar{\phi}}(\psi'', t) H(\psi', \psi'' | \bar{\psi}) d\psi' d\psi'' - \tilde{P}_{\bar{\phi}}(\bar{\psi}, t) \right\}$$

$$- \sum_{\alpha=1, \beta=1}^K \frac{\partial^2}{\partial \psi_\alpha \partial \psi_\beta} \left\langle \varepsilon_{\alpha\beta} | \bar{\phi} = \bar{\psi} \right\rangle \tilde{P}_{\bar{\phi}}(\bar{\psi}, t) = \frac{C_\phi}{2\tau_{mix}} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[(\bar{\psi} - \bar{\phi}) \tilde{P}_{\bar{\phi}}(\bar{\psi}, t) \right] \quad (12)$$

در رابطه اخیر C_ϕ پارامتر ثابت مدل می‌باشد. در مرجع [4] عباراتی تحلیلی برای میزان عدم اختلاط به صورت تابعی از مقیاس زمانی اختلاط برای دو مدل فوق‌الذکر ارائه شده و نشان داده شده است که به ازای مقدار $1/3$ برای پارامتر مزبور، مقادیر نظری عدم اختلاط در حالت ایستای آماری برای دو مدل یکسان می‌باشد. به عبارت دیگر در این حالت و در صورت استفاده از مقداری یکسان برای مقیاس زمانی اختلاط، سطح عدم اختلاط تخمینی هر دو مدل یکسان خواهد بود.

3-4- معادلات حاکم

رآکتور PaSR مورد بررسی در این مطالعه از یک محفظه بی‌دررو و یک ورودی و یک خروجی تشکیل یافته است (مشابه رآکتور PSR در شکل (1)). جریان پایای مواد واکنشی با ترکیب شیمیایی و دمای مشخص وارد محفظه شده و واکنش‌های احتراقی درون رآکتور به صورت فشار- ثابت انجام می‌پذیرد. برای آنکه بتوان تحولات PDF را به نحو مناسب و با استفاده از روش تصادفی بررسی نمود، در این مطالعه همواره از معادلات گذرای رآکتور استفاده می‌گردد. معادلات حاکم بر رآکتور در این حالت نیز مشابه معادلات (8) و (9) می‌باشد با این تفاوت که برخی پارامترها با میانگین ensemble آنها جایگزین شده است. در واقع خواص میانگین رآکتور آمیخته جزئی از مجموع ذرات درون رآکتور به دست می‌آید که هر ذره به صورت یک رآکتور کاملاً آمیخته مستقل در نظر گرفته شده و این رآکتورها از طریق فرآیند اختلاط مولکولی با یکدیگر تعامل دارند. لذا معادلات بقا به جای آنکه برای رآکتور اعمال شود، برای تک‌تک ذرات و به صورت زیر اعمال می‌شود [14]:

(13)

$$\frac{dY_i^{(n)}}{dt} = \frac{1}{\tau_{res}} (Y_i - \langle Y_i \rangle) + \frac{W_i \alpha_i^{(n)}}{\rho^{(n)}} \quad , \quad i = 1..N_s$$

$$\frac{dT^{(n)}}{dt} = \frac{1}{\bar{c}_p^{(n)} \tau_{res}} \sum_{i=1}^{N_s} Y_i (h_i - \langle h_i \rangle) - \sum_{i=1}^{N_s} \frac{W_i \alpha_i^{(n)} h_i^{(n)}}{\rho^{(n)} \bar{c}_p^{(n)}} \quad (14)$$

در روابط فوق نماد $\langle \rangle$ بیانگر میانگین ensemble بوده و در این مطالعه به عنوان تقریبی از میانگین density-weighted در نظر گرفته شده است. همچنین (n) نیز بیانگر شماره ذره بوده و زمان اقامت متوسط رآکتور نیز از رابطه $\tau_{res} = \langle \rho \rangle V / \dot{m}$ محاسبه می‌شود.

4-4- الگوسازی تصادفی

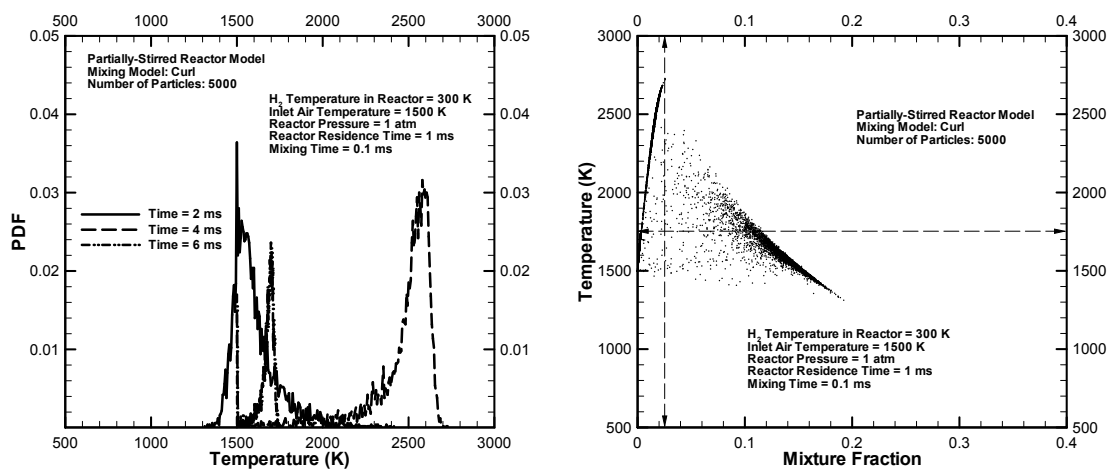
برای مطالعه عددی رآکتور آمیخته جزئی از روش پیمایش زمانی (time marching) با یک گام زمانی Δt برای حل معادله $\tau_{res} = \langle \rho \rangle V / \dot{m}$ استفاده شده و شبیه‌سازی تصادفی با استفاده از پروسه زیر و با N ذره آماری به انجام می‌رسد. الف) جابجایی: تعداد ذرات صحیح در یک گام زمانی به صورت $N_c = N \times \Delta t / \tau_{res}$ انتخاب می‌شود. در ابتدا مشخصه‌های این N_c ذره از کل ذرات معادل خواص مخلوط ورودی در نظر گرفته شده و تغییرات خواص آماری به واسطه اختلاط و واکنش شیمیایی توسط دو مرحله بعدی محاسبه می‌گردد.

ب) اختلاط مولکولی: در صورت استفاده از مدل اختلاط پیراسته Curl، تعداد $N_m = C_m N \times \Delta t / \tau_{mix}$ ذره برای اختلاط با یکدیگر انتخاب می‌شود که C_m در رابطه اخیر، پارامتر مدل مزبور به حساب می‌آید. در صورت استفاده از مدل IEM، میزان عدم اختلاط از رابطه $1/(1 + C_\phi \tau_{res} / \tau_{mix})$ محاسبه شده و تحولات آماری در بازه زمانی مورد نظر تعیین می‌گردد. رابطه اخیر

با جاگذاری رابطه (12) در معادله (10) به دست می‌آید. در صورتی که رابطه (11) در معادله (10) جاگذاری گردد، رابطه‌ای مشابه به دست خواهد آمد که مقدار عددی C_{θ} در آن معادل $1/3$ می‌باشد (همانگونه که پیشتر نیز اشاره شد، به ازای مقدار $1/3$ برای پارامتر مزبور، مقادیر نظری عدم اختلاط در حالت ایستای آماری برای دو مدل یکسان می‌باشد) [4].
(ج) واکنش شیمیایی: در مرحله آخر سینتیک شیمیایی برای هر ذره با استفاده از معادلات (13) و (14) در بازه زمانی Δt حل می‌شود. پروسه مذکور برای گام‌های زمانی بعدی و تا رسیدن به انتهای بازه زمانی کلی حل تکرار می‌گردد.

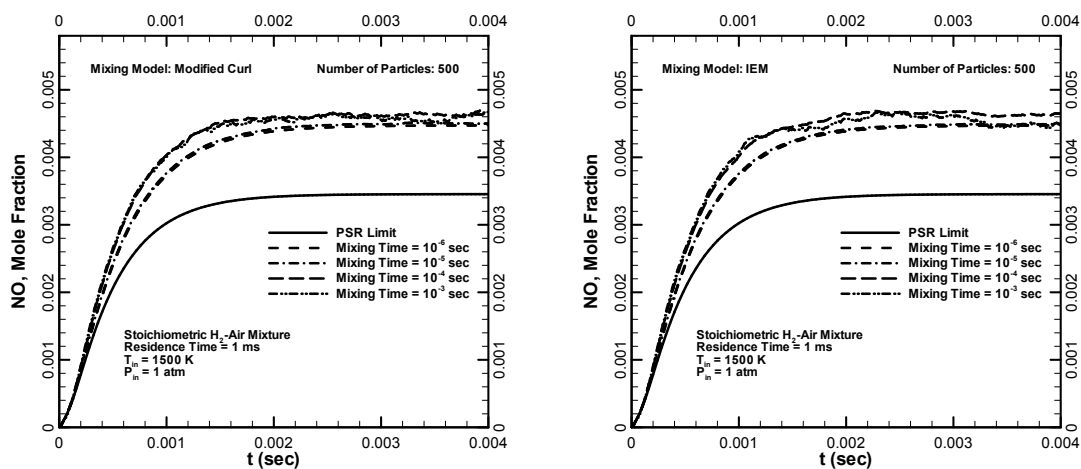
5- نتایج عددی

کلیه شبیه‌سازی‌های انجام شده در این مطالعه با استفاده از نرم‌افزارهای AURORA [8] و PASR [14] در مجموعه CHEMKIN (ویرایش 3.7.1) صورت پذیرفته است. از آنجایی که حل معادلات راکتور کاملاً آمیخته قبلاً به تفصیل ارائه شده است [15]، لذا در این قسمت بیشتر توضیحات مربوط به حل راکتور آمیخته جزئی و نتایج حل آن می‌باشد.
برای شروع مطالعه و اطمینان از صحت فرآیند حل ابتدا مساله چن (Chen) [4] مورد بررسی قرار گرفته است. در این مساله اشتعال هیدروژن در فشار اتمسفریک مطالعه می‌شود. راکتور در ابتدا شامل هیدروژن خالص در دمای 300 کلوین بوده و سپس هوا با دمای 1500 کلوین و به صورت پایا به درون راکتور جریان می‌یابد. زمان اقامت متوسط راکتور 1/0 میلی ثانیه لحاظ شده و زمان اختلاط نیز 0/1 میلی ثانیه در نظر گرفته شده است. هوای داغ با ورود به درون راکتور با هیدروژن مخلوط شده و آن را مشتعل می‌سازد. اگرچه در شبیه‌سازی‌های انجام شده در راکتور آمیخته جزئی، غالباً استقلال نتایج از تعداد ذرات انتخابی با استفاده از چند صد ذره تضمین می‌شود، ولی در بررسی این مساله نمونه از 5000 ذره برای مطالعه استفاده شده است. همچنین مدل پیراسته Curl برای الگوسازی اختلاط مورد استفاده قرار گرفته است. حل معادلات گذرای حاکم در تمام مطالعات این نوشتار نیز با استفاده از بسته نرم‌افزاری DASPK [16] صورت پذیرفته است. نتایج شبیه‌سازی در شکل (2) ارائه شده است. در این شکل نمودار پراکندگی دمای ارائه شده بر حسب کسر مخلوط در زمان‌های مختلف 2/0، 4/0 و 6/0 میلی‌ثانیه به همراه تابع دانسیته احتمال دما در همین مقاطع زمانی نمایش داده شده است. اگرچه مکانیزم شیمیایی مورد استفاده در این مطالعه با مکانیزم شیمیایی مرجع [4] متفاوت می‌باشد، ولیکن روند کلی حل مشابه بوده و می‌توان به صحت فرآیند و نتایج حل اطمینان داشت. همانگونه که در نمودار توزیع پراکندگی می‌توان مشاهده نمود، در گذر از زمان‌های اولیه حل (ذراتی که غالباً در دو ربع سمت راست نمودار پراکنده‌اند)، تا زمان‌های انتهایی حل (ذراتی که بیشتر در ربع پایینی سمت چپ شکل به صورت مجتمع حضور دارند)، وضعیت ذرات از کسر مخلوط واحد و دمای 300 کلوین به سمت کسر مخلوط استوکیومتریکی (با دمای ماکزیمم) و به دنبال آن به شرایط مصرف کامل هیدروژن و جریان بدون واکنش هوای 1500 درجه کلوین در راکتور سیر می‌نمایند. نمودار مربوط به توزیع دانسیته احتمال نیز موید همین روند است.

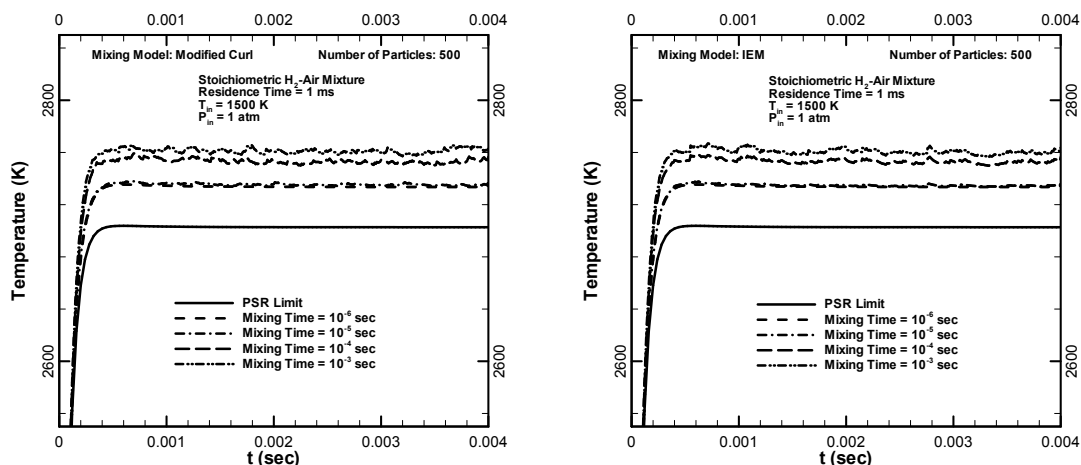


شکل 2- نمودار پراکندگی و تابع توزیع احتمال دما در راکتور PaSR با استفاده از مدل Curl در زمان‌های مختلف

با اطمینان از صحت نتایج حل، مجموعه‌ای از مطالعات پارامتریک برای بررسی اثر اختلاط مولکولی ناقص بر عملکرد و آلاینده‌های ناشی از احتراق پیش‌آمیخته هیدروژن و هوا صورت گرفته است که نمونه‌ای از نتایج این مطالعات در شکل‌های (3) و (4) ارائه شده است. در این مطالعات نیز زمان اقامت متوسط راکتور معادل $1/0$ میلی‌ثانیه فرض شده است. راکتور اتمسفریک فرض شده و جریان مخلوط استوکیومتری هیدروژن و هوا در آن مدل‌سازی شده است. تعداد ذرات برابر با 500 در نظر گرفته شده و رفتار راکتور با استفاده از مدل‌ها و زمان‌های اختلاط مختلف مطالعه گردیده و با مساله مشابه در راکتور کاملاً آمیخته مقایسه گردیده است. همانگونه که در نمودارها نیز مشخص شده است، اختلاف مقادیر کسر مولی NO و دمای پیش‌بینی شده توسط دو راکتور حاکی از تاثیر عمده اختلاط مولکولی ناقص بر رفتار احتراقی و میزان آلاینده‌ها می‌باشد.



شکل 3- مقادیر کسر مولی NO پیش‌بینی شده در راکتور PSR و راکتور PaSR با استفاده از زمان‌ها و مدل‌های اختلاط مختلف



شکل 4- مقادیر دمای پیش‌بینی شده در راکتور PSR و راکتور PaSR با استفاده از زمان‌ها و مدل‌های اختلاط مختلف

6- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این مطالعه اثر اختلاط مولکولی غیر کامل بر احتراق پیش‌آمیخته هیدروژن و هوا با استفاده از مدل PaSR مورد مطالعه قرار گرفته است. بدین منظور الگوسازی تصادفی راکتور آمیخته جزئی با استفاده از دو مدل اختلاط متعارف و مکانیزم

سینتیک شیمیایی کامل احتراق هیدروژن صورت پذیرفته است. برای بررسی اثر اختلاط ناقص بر رفتار احتراق پیش‌آمیخته، خروجی‌های مدل مزبور با نتایج شبیه‌سازی گذرای رآکتور کاملاً آمیخته مقایسه شده است. نتایج شبیه‌سازی‌ها حاکی از تاثیر چشمگیر اختلاط مولکولی ناقص بر احتراق پیش‌آمیخته هیدروژن بوده است. محاسبات نشان داده که با افزایش زمان اختلاط، شرایط از حالت ایده‌آل رآکتور کاملاً آمیخته فاصله گرفته و در نتیجه سطح آلاینده‌های NO ناشی از احتراق به سبب عدم اختلاط مولکولی کامل افزایش می‌یابد. چنین روندی برای هر دو مدل اختلاط مورد مطالعه مشاهده گردیده است.

مراجع

- 1- Soroudi M.A., and Ghafourian A., "Simplification of Natural-Gas Combustion Chemical Kinetics in a Perfectly-Stirred Reactor," 1st Combustion Conference of Iran, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, 2006 (in persian)
- 2- Soroudi M.A., Using Simplified Chemical Kinetics in Natural-Gas Combustion Modeling, M.Sc. Thesis, Faculty of Aerospace Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran, 2004 (in persian).
- 3- Correa S.M., "Turbulence-Chemistry Interactions in the Intermediate Regime of Premixed Combustion," Combustion and Flame, Vol. 93, pp. 41-60, 1993.
- 4- Chen J.-Y., "Stochastic Modeling of Partially Stirred Reactors," Combustion Science and Technology, Vol. 122, pp. 63-94, 1997.
- 5- Bowman C.T., Hanson R.K., Davidson D.F., Gardiner W.C.J., Lissinsky V., Smith G.P., Golden D.M., Frenklach M., and Goldenberg M., "GRI-Mech Home Page," http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, 2000.
- 6- GAS-PHASE-KINETICS Core Utility Manual, CHEMKIN Collection, Release 3.7.1, Reaction Design, 2003.
- 7- Glarborg P., Kee R.J., Grcar J.F. and Miller J.A., "PSR: A Fortran Program for Modeling Well-Stirred Reactors," Sandia National Laboratories Report, SAND86-8209, 1986.
- 8- AURORA Application User Manual, CHEMKIN Collection, Release 3.7.1, Reaction Design, 2003.
- 9- Lieuwen T., Neumeier Y., Zinn B.T., "The Role of Unmixedness and Chemical Kinetics in Driving Combustion Instabilities in Lean Premixed Combustors," Combustion Science and Technology, Vol. 135, pp. 193-211, 1998.
- 10- Pope S.B., "A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flow," Combustion Science and Technology, Vol. 25, pp. 159-174, 1981.
- 11- Pope S.B., "PDF Methods for Turbulent Reactive Flows," Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 11, pp. 119-192, 1985.
- 12- Janicka J., Kolbe W., and Kollmann W., "Closure of the Transport Equation for the Probability Density Function of Turbulent Scalar Field," Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics, Vol. 4, pp.47-66, 1979.
- 13- Dopazo C., "Probability Density Function Approach for a Turbulent Axisymmetric Heated Jet Centerline Evolution," Physics of Fluids, Vol. 18, pp. 397-404, 1975.
- 14- PASR Application User Manual, CHEMKIN Collection, Release 3.7.1, Reaction Design, 2003.
- 15- Soroudi M.A. and Ghafourian A., "Study of Detailed Chemical Kinetics of Natural-Gas Combustion in a Perfectly-Stirred Reactor," 12th Annual (International) Conference of Iranian Society of Mechanical Engineers, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, 2004 (in persian).
- 16- Li S., and Petzold L.R., "Software and Algorithms for Sensitivity Analysis of Large-Scale Differential Algebraic Systems," Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 125, pp. 131, 2000.