



FCCI2010-1211



دانشگاه صنعتی امیرکبیر
دانشکده مهندسی هوافضا

مطالعه عددی کیفیت رابطه آشفته‌گی و سینتیک شیمیایی در احتراق Mild در دو حالت متقارن محوری و سه بعدی

امیر مردانی^{۱*}، صادق تابع جماعت^۲

تهران، خیابان حافظ، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده هوافضا

Amir_mardani@aut.ac.ir

چکیده

در مقاله جاری نوسانات پارامترهای میدان جریان در احتراق Mild مطالعه شده است. بدین منظور جت Coflow مخلوط CH_4+H_2 در هوای پیش گرم شده تا دمای ۱۳۰۰ کلوین و دارای ۹ و ۳ درصد اکسیژن مبنای مدل‌سازی قرار گرفته است (proceeding of the Combustion Institute, 29, pp:1147-1154). در مدل‌سازی این رژیم احتراقی به وسیله معادلات RANS به ترم نرخ تولید و مصرف گونه های شیمیایی توجه شده است. به وسیله ارزیابی میزان تاثیر استفاده از مدل‌های توربولانسی نظیر EDC برای ایجاد ارتباط مناسب بین شیمی واکنشها و آشفته‌گی میدان در محاسبه میزان تولید و مصرف گونه های مختلف، اهمیت نوسانات غلظت گونه های شیمیایی و دما در رژیم احتراقی Mild مطالعه شده است. جت در دو میدان محاسباتی دو بعدی متقارن محوری و سه بعدی توسط معادلات RANS و مدل توربولانسی k-e اصلاح شده و مکانیزم شیمیایی کاهش یافته DRM22 به همراه روابط نرخ محدود آرنیوس مدل‌سازی شده است. مشاهده گردید که مشخصات خاص رژیم احتراقی Mild نظیر کاهش نوسانات دمایی و آرام بودن واکنشها و گسترده و یکنواخت بودن منطقه واکنش منجر به کاهش اهمیت خواص نوسانی میدان جریان نمی شود و عواملی مانند کاهش درصد اکسیژن و کاهش رینولدز جریان که منجر به یکنواخت شدن میدان دمایی و منطقه واکنش در این رژیم احتراقی می شوند موجب کوچکتر شدن اثر ترمهای نوسانی در نرخ تولید و مصرف گونه های شیمیایی نشده و در صورت عدم ایجاد رابطه مناسب بین آشفته‌گی جریان و شیمی واکنش خطای محاسباتی مخصوصا در پیش بینی غلظت گونه های شیمیایی افزایش خواهد یافت. مقایسه نتایج مدل‌سازی سه بعدی و متقارن محوری برتری مدل‌سازی سه بعدی را مخصوصا در داخل جت را نشان داد.

واژه‌های کلیدی: احتراق Mild - رقیق سازی - آشفته‌گی - متان - هوا.

۱- مقدمه

احتراق تحت شرایطی که میزان اکسیژن در دسترس به وسیله رقیق سازی بسیار کم و همچنین اکسیدایزر تا دمای بالایی پیش گرم شده باشد بطوریکه مخلوط واکنش دهنده ها به حد خوداشتعالی رسیده باشند، با اسامی متعددی از جمله [۱,۲] Flameless، Mild، HiTAC و HiCOT[۳] شناخته می شود. رژیم احتراقی مذکور در دهه اخیر از نظر صرفه جویی در مصرف سوخت و کاهش تولید آلاینده ها بسیار مورد توجه قرار گرفته است. مطالعات تجربی و عددی متعدد نشان داده است که در این رژیم احتراقی در محفظه احتراق توزیع دما یکنواختتر، منطقه واکنش بزرگتر [۴, ۵ و ۶]، نوسانات دما و گونه های شیمیایی کمتر و نرخ انجام واکنشها نیز نسبت به احتراق متعارف کمتر می باشد [۷, ۸, ۱]. [۹, ۱۰] نشان داده اند که عدد دامکوهلر در این رژیم احتراقی علی رغم احتراقهای متعارف کوچک است و لذا نرخ انجام واکنشها محدود بوده و در نتیجه آشفته‌گی جریان پارامتر حاکم بر میدان و انجام واکنشها نمی باشد. همچنین فرضهای واکنش سریع در مدل‌سازی عددی این رژیم احتراقی فرض فیزیکی مناسبی به نظر نمی رسند. به همین دلیل ویژگیهای محفظه احتراق well stirred reactor به این رژیم احتراقی نزدیک می باشد.

۱- دانشجوی دکتری، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده هوافضا

۲- دانشیار، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده هوافضا



FCCI2010-1211

سومین کنفرانس سوخت و احتراق ایران

تهران - دانشگاه صنعتی امیرکبیر - اسفند ماه ۱۳۸۸



دانشگاه صنعتی امیرکبیر

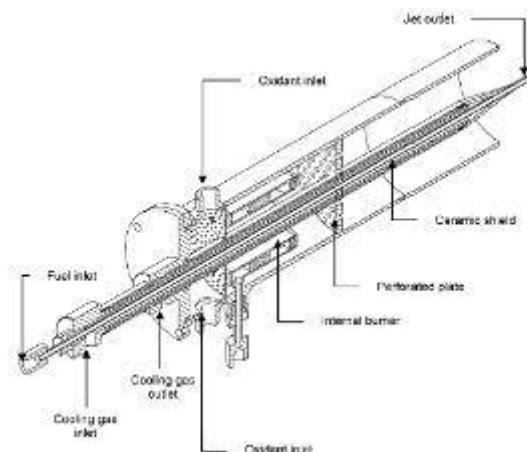
دانشکده مهندسی هوافضا

در احتراق Mild به علت کند شدن واکنشها و کاهش دامنه نوسانات پارامترهایی نظیر دما رژیم جریان از احتراق متعارف متفاوت بوده و همین امر موجب شده است که تلاشهای زیادی جهت ارائه مدل مناسب برای محاسبه رابطه بین شیمی واکنش و آشفستگی جریان صورت پذیرد. کوالهو و همکارش پیتر [۱۱] در سال ۲۰۰۱ احتراق Mild را به روش Flamelet به منظور بررسی اثر متقابل توربولانس و شیمی واکنش بررسی نمودند. اگر چه بصورت کیفی بین نتایج تجربی و عددی تشابه وجود داشت اما در محاسبه زمان اقامت مواد و میزان تولید آلاینده ها مشکل و خطا دیده می شود. بلازیاک [۱۲] و دالی [۱۳] با اعمال مدل‌های احتراقی مختلف نشان داده اند که مدل EDC رابطه بین آشفستگی جریان و تولید گونه های شیمیایی را بهتر از سایر مدلها نظیر مدل‌های احتراقی پایه اسکالر نظیر Mixture fraction/PDF و Flamelet بیان می کند. زیرا در این مدل محفظه احتراق به حجمهایی با فشار یکنواخت که در آنها واکنشها تحت شرایط نرخ محدود و زمان معینی انجام می شوند، تقسیم می شوند. حجم این سلولها و زمان اقامت گونه ها در آنها از طریق مشخصات آشفستگی میدان استخراج می گردند [۱۴]. گالتی [۱۵، ۱۶] نیز گزارش نموده است که، استفاده از مدل EDC در مدلسازی مشعل Mild خودش نتایج مطلوبی داشته است. در حالیکه در شعله آشفته متعارف نوسانات دما حتی تا حدود ۱۰۰ درجه سانتی گراد [۱۷] و یا حتی ۷۰٪ [۱۸] نیز می تواند باشد، کاهش نوسانات دما تا حدود کمتر از ۴٪ و حتی ۱٪ در احتراق mild توسط [۹ و ۱۰] گزارش شده است. در معادلات RANS واراناز [۱۸] نشان داده است که در معادله نرخ آرنیوس، در احتراق آشفته معمولی، استفاده از دمای متوسط در محاسبه ضریب آرنیوس منجر به خطای غیر قابل قبولی خواهد شد. همچنین اشاره شده است که در صورتی استفاده از غلظت متوسط گونه های شیمیایی منجر به خطای قابل قبول در محاسبه نرخ تولید و مصرف گونه ها خواهد شد که نوسان غلظت گونه های شیمیایی کوچک باشند. استفاده از مقدار متوسط متغیرها به جای مقدار لحظه ای آنها در محاسبه نرخ تولید و مصرف گونه های شیمیایی منجر به ایجاد خطا در مدلسازی خواهد شد که این خطا متناسب با دامنه و فرکانس نوسانات مشخصات میدان جریان در هر مکان می باشد و بیانگر میزان تاثیر و اهمیت آشفستگی در انجام واکنشهای شیمیایی در رژیم جریان مورد مطالعه می باشد. بر همین مبنا با توجه این خطا، کارایی مدل‌های اغتشاشی که رابطه بین سینتیک شیمیایی و آشفستگی را بیان می کنند را می توان ارزیابی نمود.

با توجه به اینکه در رژیم احتراقی Mild در مقایسه با احتراق متعارف ترمهای نوسانی دما کوچکتر بوده و منطقه واکنش وسیعتر و یکنواختتر می باشند، تعامل سینتیک شیمیایی و آشفستگی جریان با احتراقهای متعارف متفاوت بوده و به نظر میرسد که این بحث نیاز به مطالعه بیشتری دارد. در مقاله جاری موضوع میزان اهمیت احتساب آشفستگی جریان در محاسبه نرخ تولید و مصرف گونه های شیمیایی تحت شرایط رژیم احتراقی Mild در دو حالت مدلسازی متقارن محوری و سه بعدی مدنظر قرار گرفته و تاثیر پارامترهای اصلی احتراق Mild نظیر غلظت اکسیژن و رینولدز جریان بر آن مطالعه شده است.

۲- معادلات حاکم و مدلسازی عددی

با توجه به مطالعات و ارزیابی نتایج تجربی پژوهشگران مختلف سیستم و نتایج تجربی دالی [۱۹] مبنای مطالعه و مدلسازی قرار گرفت. همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است، مدل تجربی یک شعله متقارن محوری می باشد و به دور از پیچیدگیهای هندسی امکان مطالعه بهتر فرآیند احتراق Mild را فراهم می آورد. مشعل مذکور در یک تونل باد با سرعت هوای ۳.۲ متر بر ثانیه بگونه ای که محور مشعل موازی جریان تونل باشد، قرار گرفته است. اطلاعات مدل در مرجع ذکر شده قابل دسترس می باشد.



شکل ۱- مشعل مدل‌سازی شده.

جهت مدل‌سازی کدی که بر مبنای الگوریتم 1^{st} Simpler پاتانکار که توسط رحمان [۲۰] در شبکه هم مکان اعمال شده، به حل معادلات بقاء $RANS^2$ می پردازد، مورد استفاده قرار گرفته است. جهت بستن معادلات از معادلات استاندارد $k-\epsilon$ اصلاح شده که توسط دالی پیشنهاد گردید است، استفاده شده است. در این معادلات ضریب $C_{\epsilon 1}$ در معادله استهلاک انرژی توربولانس از $1/44$ به $1/6$ تغییر یافته است. جهت گسسته سازی معادلات از روش بالادست QUICK استفاده شده است. پروفیل‌های سرعت در ورودی از مدل‌سازی جریان در بالادست مشعل (داخل ورودی‌ها) بدست آمده است. نتایج تحقیق دالی [۱۳] حاکی از آن است که تشعشع حرارتی در مشعل JHC، اثر قابل توجهی در نتایج مدل‌سازی ندارد، لذا با توجه به هزینه سنگین محاسبات انتقال حرارت تشعشعی از آن در تحقیق جاری صرف‌نظر شده است. در محاسبه نفوذ اجزاء شیمیایی از قانون فیک به همراه ضرایب باینری نفوذ که به وسیله تئوری کینتیک مولکولی محاسبه شده اند، استفاده شده است [۱۸].

به منظور حل معادلات متوسط گیری شده می بایست نرخ متوسط تولید و مصرف اجزای شیمیایی محاسبه شوند. برای واکنش فرضی $A+B \rightarrow \text{Products}$ نرخ تولید یا مصرف جزء A مطابق قانون آرنیوس از رابطه $\omega_A = -k_R C_A C_B$ بدست خواهد آمد که در آن C_A و C_B غلظت جزئهای شیمیایی موجود و k_R نرخ انجام واکنش می باشند. با متوسط گیری از این رابطه خواهیم داشت:

$$\overline{\omega_A} = \overline{-k_R C_A C_B} = \left(\overline{-k_R C_A C_B} \right) + \left(-k'_R C'_A C'_B + \dots \right) \equiv \text{part one} + \text{part two} \quad (1)$$

که در این رابطه قسمت اول (part one) ناشی از مقادیر متوسط متغیرها و قسمت دوم (part two) ناشی از نوسانات پارامترها می باشند.

جهت وارد کردن اثر نوسانات دما و اجزاء شیمیایی در محاسبه نرخ تولید و مصرف گونه‌ها با توجه به نتایج دالی [۱۳] و بلازیاک [۱۲] از مدل EDC به همراه مکانیزم شیمیایی کاهش یافته DRM22 [۲۱] استفاده شده است. مکانیزم DRM22 و DRM19 مکانیزمهای کاهش یافته GRI1.2 [۲۲] با به ترتیب ۲۲ و ۱۹ گونه شیمیایی و ۱۰۴ و ۸۴ واکنش رفت و برگشت می باشند. گروه پارتیه [16] عملکرد مناسب مکانیزم DRM19 در مقایسه با مکانیزم کامل GRI3.0 [۲۳] در مدل‌سازی احتراق Mild را نشان داده اند. گروه کازاکو [21] نیز عملکرد بهتر DRM22 در مقایسه با DRM19 در پیش بینی زمان تاخیر در جرقه و سرعت شعله آرام را گزارش نموده اند. در نهایت مکانیزم کاهش یافته DRM22 پس از اطمینان نویسندگان از دقت

¹ Semi-Implicit Method

² Reynolds Average Navier Stokes Equations

مناسب نتایج آن در مقایسه با مکانیزم کامل GRI2.11 [۲۴] به عنوان مکانیزم شیمیایی در تحقیق جاری مورد استفاده قرار گرفته است.

در احتراق آشفته معمولی قسمت دوم رابطه (۱) در مقایسه با قسمت اول رابطه، مهم بوده و قابل صرف نظر کردن نمی باشد. در احتراق Mild به علت اینکه در مقایسه با احتراق متعارف آشفته، نوسانات دما کوچکتر بوده و منطقه واکنش وسیعتر و یکنواختتر می باشد [۵ و ۹]، لذا اهمیت قسمت دوم و رابطه قسمت دوم و اول معادله (۱) احتمالاً نسبت به احتراق متعارف متفاوت می باشد. این ویژگی در مقاله جاری مدنظر قرار گرفته است. بدین صورت که با عدم اعمال مدل توربولانسی در محاسبه نرخ تولید و مصرف اجزاء شیمیایی به وسیله قانون آرنیوس در واقع فقط قسمت اول معادله (۱) در نظر گرفته شده است و نتایج آن با حالتی که در محاسبه نرخ تولید و مصرف اجزاء از مدل EDC^۱ و قانون آرنیوس استفاده شده (یعنی هر دو قسمت محاسبه شده اند)، مقایسه گردیده است.

مدل احتراقی EDC، توسعه یافته مدل ED^۲ و با امکان در نظر گرفتن مکانیزم شیمیایی کامل در جریان آشفته می باشد [۲۵].

این مدل میدان حل را بصورت نواحی با ابعاد $\zeta = c_{\tau} \left(\frac{U\varepsilon}{k^2} \right)^{3/4}$ که در واقع هر ناحیه بصورت یک CPR^۳ می باشد و مواد در

داخل این ناحیه در طی مدت زمان $\tau = c_{\tau} \left(\frac{U}{\varepsilon} \right)^{1/2}$ و تحت فرآیند نرخ محدود و مطابق قانون آرنیوس واکنش می دهند، در

نظر می گیرد. در این روابط U ویسکوزیته سینماتیکی، ε نرخ استهلاك انرژی توربولانس، k انرژی توربولانس، c_{τ} ضریب نسبت حجمی برابر با ۲/۱۳۷۷، c_{τ} ثابت زمانی برابر با ۰/۴۰۸۲ می باشند.

پارامتر $Error_{n@(i,j)}$ که بیانگر میزان تاثیر توربولانس در تولید و مصرف جزء شیمیایی n در مکان مشخص (i,j) می باشد بصورت زیر تعریف شده است:

$$Error_{n@(i,j)} = \frac{\omega_{n@(i,j)(EDC)} - \omega_{n@(i,j)(Finite Rate)}}{\omega_{EDC,Max@z}} \times 100 \quad (۲)$$

$\omega_{n@(i,j)}$ نرخ تولید و یا مصرف جزء شیمیایی n در موقعیت مکانی (i,j) و پارامتر $\omega_{EDC,Max@z}$ ماکزیمم نرخ تولید و یا مصرف از میان گونه های مختلف در فاصله Z از دهانه نازل می باشد. مقدار متوسط آن نیز در هر مکان با متغیر $AvError_{(i,j)}$ و به صورت زیر تعریف شده است.

$$AvError_{(i,j)} = \frac{\sum_{k=1}^N Error_{k@(i,j)}}{N} \quad N : \text{Number of species} \quad (۳)$$

پارامتر دیگری نیز با عنوان $T variation_{(i,j)}$ بصورت زیر تعریف شده است که بیانگر درصد تغییر نسبی دما در اثر عدم استفاده از مدل توربولانسی در محاسبه تولید و مصرف گونه های شیمیایی در مکانی با مختصات (i,j) می باشد.

$$T variation_{(i,j)} = \frac{T_{(i,j)(EDC)} - T_{(i,j)(Finite Rate)}}{T_{(i,j)(EDC)}} \times 100 \quad (۴)$$

میدان حل با توجه به متقارن محوری بودن هندسه در حالت دو بعدی بصورت متقارن محوری در نظر گرفته شده است و جهت مشاهده اثرات سه بعدی، مدل سه بعدی آن نیز مدنظر قرار گرفته است. در شکل ۲ میدان های حل در محیط محاسباتی برای

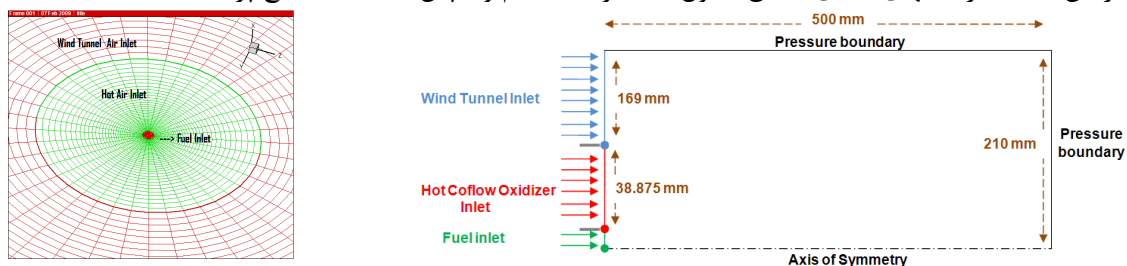
^۱ Eddy Dissipation Concept

^۲ Eddy Dissipation Model

^۳ Constant Pressure Reactor

حالت دو بعدی و سه بعدی نشان داده شده است. پس از اطمینان از استقلال جوابها از شبکه میدانهای با ۳۹۰۰۰ سلول سازمان یافته مستطیلی شکل برای حالت دوبعدی و ۷۰۰۰۰۰ سلول شش وجهی برای حالت سه بعدی مدنظر قرار گرفته اند. در حالت سه بعدی میدان محاسباتی به شکل استوانه ای در نظر گرفته شده است که فقط بخشی از قاعده آن که محل ورود جریان جت می باشد، در شکل ۲ نشان داده شده است. جهت اطمینان از همگرایی حل نیز دو معیار مدنظر قرار گرفته است. آنها عبارتند از کاهش تغییرات تمامی متغیرها نظیر دما، سرعت و غلظت گونه ها تا حد کوچکتر از ۰/۰۰۰۱ و یا عدم نوسان یک پارامتر مهم در یک نقطه حساس میدان (مانند محل حداکثر دما) تا حد بیشتر از ۰/۱٪.

در این مطالعه آزمایشهای عددی مطابق جدول (۱) تعریف، انجام و سپس به مقایسه نتایج پرداخته شده است.



ورودی های میدان استوانه ای در حالت سه بعدی

دوبعدی-مقارن محوری

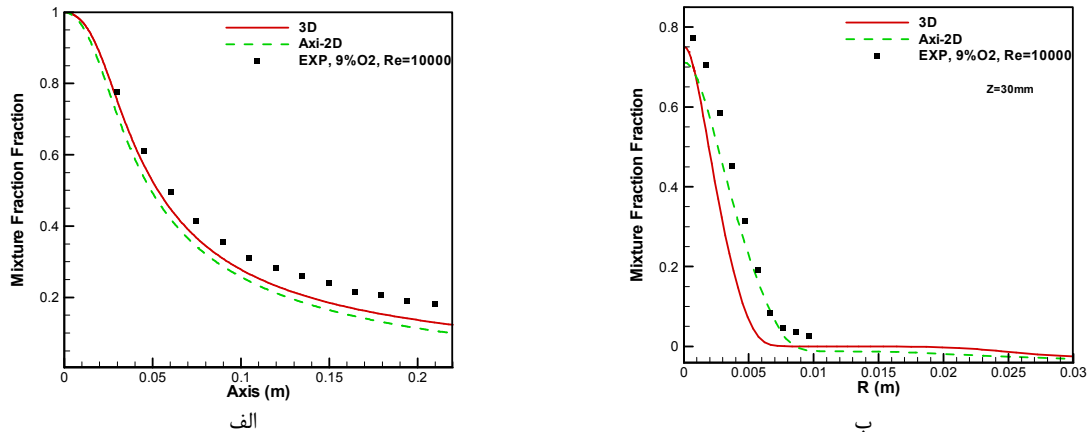
شکل ۲- هندسه بکار رفته در مدلسازی عددی دوبعدی-مقارن محوری و سه بعدی (شکل مقیاس نشده می باشد)

جدول ۱- مشخصات آزمایشات انجام شده در تحقیق جاری (درصد های گونه های مخلوط بصورت جرمی می باشند).									
No.	Jet Re	(V, T) _{hot Oxidizer}	(V, T) _{cold wind tunnel air}	Fuel composition	Hot oxidizer Composition	Wind tunnel air composition	Applying turbulence model to reaction rate calculation		Simulation approach
							YES	NO	
1	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20%H ₂ +80%CH ₄	9%O ₂ +6.5%H ₂ O+5.5%CO ₂ +79%N ₂	23%O ₂ +77%N ₂	*		2D
2	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20%H ₂ +80%CH ₄	9%O ₂ +6.5%H ₂ O+5.5%CO ₂ +79%N ₂	23%O ₂ +77%N ₂	*		3D
3	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20%H ₂ +80%CH ₄	9%O ₂ +6.5%H ₂ O+5.5%CO ₂ +79%N ₂	23%O ₂ +77%N ₂		*	2D
4	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20%H ₂ +80%CH ₄	3%O ₂ +6.5%H ₂ O+5.5%CO ₂ +85%N ₂	23%O ₂ +77%N ₂	*		2D
5	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20%H ₂ +80%CH ₄	3%O ₂ +6.5%H ₂ O+5.5%CO ₂ +85%N ₂	23%O ₂ +77%N ₂		*	2D
6	5000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20%H ₂ +80%CH ₄	3%O ₂ +6.5%H ₂ O+5.5%CO ₂ +85%N ₂	23%O ₂ +77%N ₂	*		2D
7	5000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20%H ₂ +80%CH ₄	3%O ₂ +6.5%H ₂ O+5.5%CO ₂ +85%N ₂	23%O ₂ +77%N ₂		*	2D
8	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20%H ₂ +80%CH ₄	3%O ₂ +6.5%H ₂ O+5.5%CO ₂ +85%N ₂	23%O ₂ +77%N ₂	*		3D
9	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20%H ₂ +80%CH ₄	3%O ₂ +6.5%H ₂ O+5.5%CO ₂ +85%N ₂	23%O ₂ +77%N ₂		*	3D

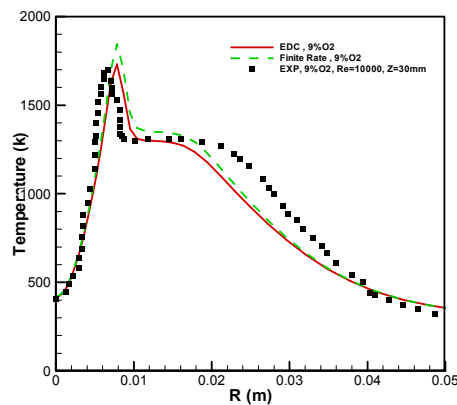
۳- بررسی و مقایسه نتایج:

در گام نخست برای ارزیابی مدلسازی صورت گرفته در مورد آزمایشهای شماره ۱ و ۲ در جدول ۱، توزیع Mixture Fraction با توجه به تعریف بیلگر [۲۶] در راستای محوری و شعاعی در شکل ۳ نشان داده شده است. مشاهده می شود که نتایج تجربی و عددی تطابق نسبتاً خوبی با یکدیگر دارند. همچنین در مدلسازی سه بعدی توزیع Mixture fraction از نظر کیفی تطبیق بهتری نسبت به مدلسازی دو بعدی با نتایج تجربی دارد. اختلاف مشاهده شده بین نتایج تجربی و عددی احتمالاً ناشی از برخی از فرضهای انجام شده در مدلسازی نظیر ثابت بودن عدد اشمیت توبولانس و عدم تطبیق کامل رینولدز و اغتشاش جت به علت تقریبی ارائه شدن آن در مقالات مرجع تجربی باشد [۱۳ و ۱۹].

توزیع شعاعی دما در فاصله ۳۰ میلی متری نازل سوخت برای آزمایشهای شماره ۱ و ۳ جدول ۱ و مقایسه آنها با نتایج تجربی در شکل ۴ نشان داده شده است. در آزمایش شماره ۱ از مدل توربولانسی EDC برای ارتباط آشفنگی و سینتیک شیمیایی در محاسبه نرخ واکنشها استفاده شده و در آزمایش شماره ۳ از مدل توربولانسی استفاده نشده است. همانطور که مشاهده می شود عدم استفاده از مدل توربولانسی منجر به پیش بینی بالاتر توزیع دما شده است. به منظور بررسی بیشتر این مطلب توزیع شعاعی پارامترهای $AvError_{(i,j)}$ و $T\ variation_{(i,j)}$ در فاصله ۳۰ میلی متری دهانه نازل در شکل ۵ نشان داده شده است. عدم استفاده از مدل توربولانسی در محاسبه نرخ انجام واکنشها منجر به تغییر حداکثر

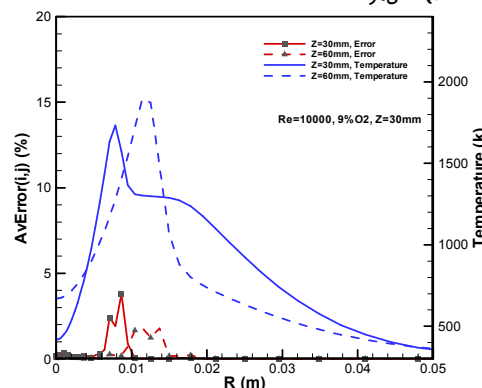
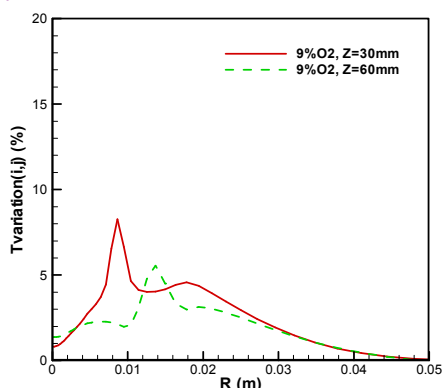


شکل ۳- توزیع Mixture Fraction و مقایسه با نتایج تجربی [۱۳ و ۱۹] برای جتی با $Re=10000$ و مکانیزم شیمیایی DRM22 در حالت مدل سازی متقارن محوری و سه بعدی (آزمایش شماره ۱ و ۲ جدول ۱): الف) در محور مشعل ب) فاصله ۳۰ میلی متری از دهانه نازل



شکل ۴- مقایسه توزیع شعاعی دما در فاصله ۳۰ میلی متری از دهانه نازل در حالت مدل سازی متقارن محوری با نتایج تجربی (آزمایش شماره ۱ و ۳ در جدول ۱)

حدود ۸ درصدی دما و حداکثر ۴ درصدی گونه های شیمیایی شده است. این پارامترها در محل حداکثر دما بیشترین مقدار را دارند. همچنین اکسترمم دوم آنها در محل تماس هوای گرم اطراف جت با هوای سرد تونل باد اتفاق می افتد. نکته دیگر اینکه با دور شدن از دهانه نازل سوخت، ماکزیمم مقدار نمودار پارامترهای $AvError_{(i,j)}$ و $T\ variation_{(i,j)}$ کوچک شده اما عرض آنها بزرگتر می گردد. به عبارت دیگر با دور شدن از نازل سوخت محدوده اثر آشفنگی گسترش یافته اما از اثرگذاری آن در میزان حداکثر خطای تولیدی در اثر عدم مدل سازی مناسب رابطه بین آشفنگی جریان و واکنشهای شیمیایی،

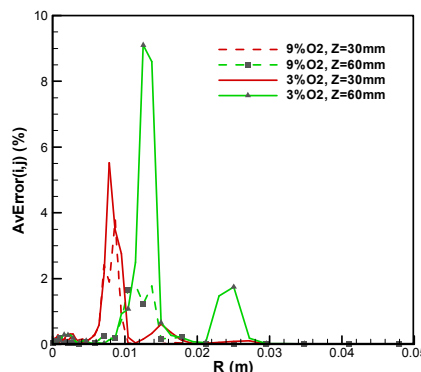
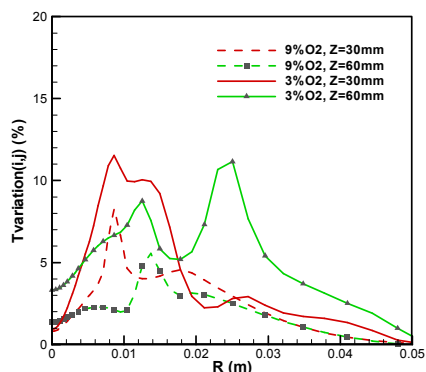


شکل ۵- توزیع شعاعی دما و پارامترهای $T variation_{(i,j)}$ و $AvError_{(i,j)}$ در فاصله ۳۰ و ۶۰ میلی متری از دهانه نازل برای جتی با $Re=10000$ در محیطی با اکسیژن ۹٪ (آزمایش ۱ و ۳ در جدول ۱)

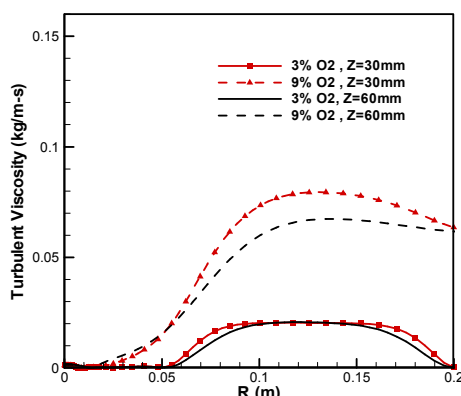
کاسته شده است. علت این امر احتمالاً افزایش دما در پایین دست جریان و افزایش نقش احتراق در آرام سازی آشفتگی جریان و همچنین گسترده شدن منطقه واکنش می باشد. میزان تغییر این پارامترها و مطالعه کمیت و کیفیت رابطه آنها با پارامترهای اصلی احتراق Mild نظیر درصد اکسیژن و Re در ادامه مطالعه شده است. در همین راستا در ادامه اثرات سه بعدی بودن مدل سازی بر روی نتایج بدست آمده نیز، بررسی شده است.

۳-۱- اثر اکسیژن:

یکی از ویژگیهای اصلی احتراق Mild رقیق بودن محیط انجام واکنشهای شیمیایی از نظر اکسیژن می باشد. مقایسه نحوه اثر اعمال و عدم اعمال مدل اغتشاشی در محاسبه نرخ تولید و مصرف گونه های شیمیایی در دو حالت اکسیژن ۳ و ۹ درصد و در دو فاصله ۳۰ و ۶۰ میلی متری از دهانه نازل در شکل ۶ قابل مشاهده می باشد. مشاهده می شود که با کاهش درصد اکسیژن اثر اغتشاشات میدان جریان بر روی سینتیک شیمیایی افزایش می یابد و عدم در نظر گرفتن آن در محاسبه نرخ تولید و مصرف گونه های شیمیایی منجر به افزایش خطا در مدل سازی شده است. هرچند کاهش درصد اکسیژن منجر به کاهش نرخ واکنشها و گسترده تر شدن منطقه واکنش و همچنین کاهش نوسانات دمایی می گردد، اما احتمالاً موجب کاهش اثر Relaminarization احتراق در میدان جریان می گردد [۱۳، ۲۷]. لذا اهمیت اغتشاشات و اثر آنها در خاموشی های موضعی افزایش خواهد یافت. این امر در شکل ۷ نشان داده شده است. مشاهده می شود که با افزایش درصد اکسیژن ویسکوزیته اغتشاشی افزایش یافته و در نتیجه استهلاك اغتشاشات شدیدتر خواهد بود. لذا عدم در نظر گرفتن مدل های اغتشاشی در محاسبه نرخ تولید و مصرف اجزاء شیمیایی منجر به ایجاد خطا در پیش بینی خاموشی های موضعی و خطای مدل سازی می گردد. همچنین این شکل نشان می دهد که در حالت ۳ درصد اکسیژن با دور شدن از نازل ورودی میزان خطاهای ناشی از



شکل ۶- توزیع شعاعی پارامترهای $T variation_{(i,j)}$ و $AvError_{(i,j)}$ در فاصله ۳۰ و ۶۰ میلی متری از دهانه نازل برای جتی با $Re=10000$ در محیطی با اکسیژن ۹٪ و ۳٪ (آزمایشهای شماره ۱، ۳، ۴ و ۵ در جدول ۱)



شکل ۷- توزیع ویسکوزیته توربولانسی در فاصله ۳۰ و ۶۰ میلی متری از دهانه نازل برای جتی با $Re=10000$ در محیطی با اکسیژن ۹٪ و ۳٪ (آزمایشهای شماره ۴ و ۱ جدول ۴)

عدم اعمال مدل توربولانسی علی رغم حالت ۹ درصد اکسیژن کاهش نمی یابد که احتمالاً با افزایش شدت واکنشها در درصدهای بالاتر اکسیژن ارتباط دارد.

نکته دیگری که در شکل‌های ۶ مشهود است عریض تر شدن نمودارها در حالت ۳٪ اکسیژن نسبت به ۹٪ اکسیژن می باشد که با موضوع افزایش حجم منطقه واکنش در درصدهای کمتر اکسیژن همخوانی داشته و نشان دهنده افزایش محدوده اهمیت آشفستگی در مدلسازی نرخ تولید و مصرف اجزاء شیمیایی می باشد.

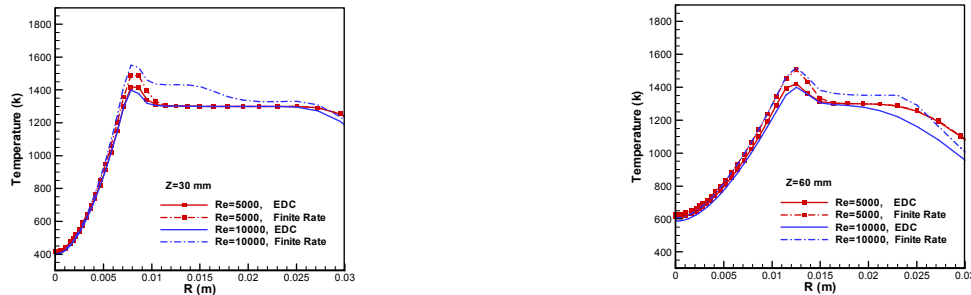
۳-۲- اثر رینولدز:

هر چند از نظر کیفی کاهش Re در یک نسبت اغتشاش ورودی ثابت منجر به کم شدن اغتشاشات جریان خواهد شد، اما این اثر و تقابل آن با نحوه مدلسازی نرخ تولید و مصرف گونه های شیمیایی بصورت کمی در بخش جاری مطالعه شده است. بدین منظور در نمونه های شماره ۶ و ۷ در جدول ۱ و با ثابت نگه داشتن درصد شدت توربولانس ورودی (۰.۷)، عدد رینولدز جت ورودی به محفظه به ۵۰۰۰ کاهش یافته است. نمودارهای توزیع شعاعی دما در دو حالت اعمال و عدم اعمال مدل توربولانسی در محاسبه نرخ تولید و مصرف گونه های شیمیایی و پارامترهای $AvError_{(i,j)}$ و $T variation_{(i,j)}$ در فاصله ۳۰ و ۶۰ میلی متری از دهانه نازل برای جتی با $Re=10000$ و $Re=5000$ در محیطی با اکسیژن ۳٪ در شکل‌های ۸ و ۹ نشان داده شده اند. نمودارهای توزیع دما بیانگر این مطلب است که حساسیت دما به اعمال مدل توربولانسی در محاسبه شدت واکنشها در رینولدز های بالاتر بیشتر است. این مطلب در نمودار توزیع $T variation_{(i,j)}$ نیز به خوبی قابل مشاهده می باشد. کاهش عدد رینولدز جریان هر چند موجب تغییرات زیاد دمایی نمی گردد اما کمی منجر به کاهش دمای ماکزیمم شعله می شود. این امر احتمالاً به علت افزایش انتقال حرارت از منطقه واکنش در اثر افزایش سرعت جریان می باشد زیرا اگر چه افزایش غلظت گونه های میانی نظیر رادیکال OH, H_2CO و HCO در شکل ۱۰ نشان دهنده افزایش شدت آزاد شدن انرژی در منطقه واکنش می باشند اما حداکثر دما افزایش نیافته است. روند تغییرات نمودارهای توزیع دما (بخصوص کوچک بودن تغییرات دما) و گونه های شیمیایی نظیر H_2CO با تغییر عدد رینولدز جت با نتایج تجربی [۲۸] مطابقت دارد.

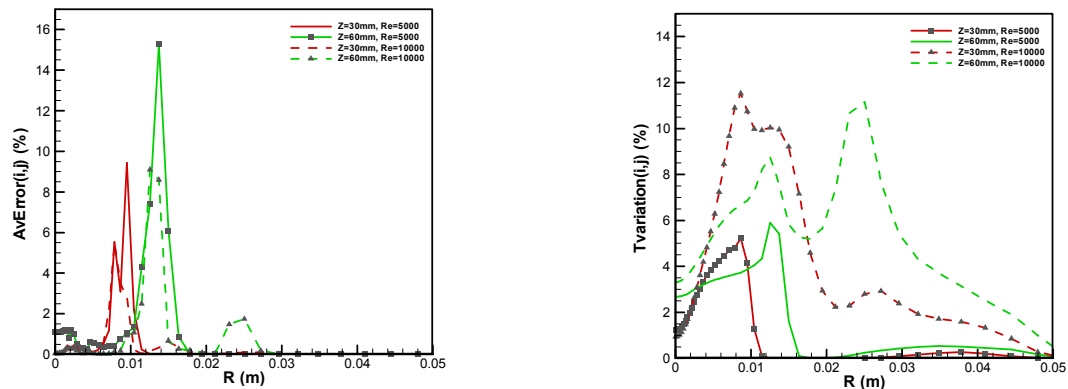
رادیکال OH (هیدرواکسیل) به عنوان نشان دهنده محل واکنش شناخته شده و گونه میانی H_2CO (فرمالدهید) نیز در محدوده های دما پایین احتراق Mild تولید می شود [۲۸] و حضور آن در محدوده غنی از سوخت نشان دهنده این مطلب است که در مراحل اولیه تجزیه سوخت تولید می شود [۲۹,۳۰]. همچنین هیدرواکسیل و فرمالدهید نشان دهنده حضور رادیکال HCO (فرمیل) می باشند که آن نیز رابطه نزدیکی با نرخ آزاد سازی حرارت در واکنشها دارد [۳۱].

مقایسه نمودارهای توزیع شعاعی پارامتر $AvError_{(i,j)}$ برای دو فاصله ۳۰ و ۶۰ میلی متری در حالت ۳ درصد اکسیژن نشان می دهند که با کاهش عدد رینولدز میزان این پارامتر علی رغم پارامتر $T variation_{(i,j)}$ افزایش می یابد. علت این امر

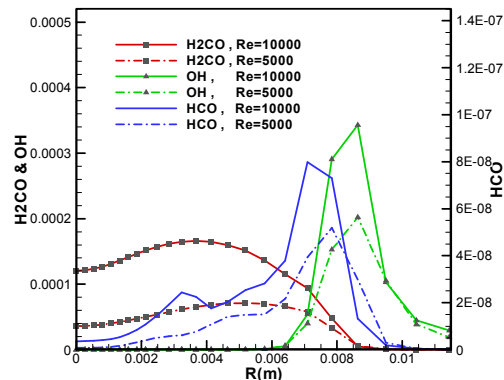
احتمالا افزایش تولید گونه های میانی مانند رادیکال H_2CO , OH و HCO در اثر افزایش رینولدز و شدت واکنشها و در نتیجه قدرت آرام کنندگی بالاتر واکنشهای شیمیایی و نرخ بالاتر استهلاک آشفته می باشد.



شکل ۸- توزیع شعاعی دما در فاصله ۳۰ و ۶۰ میلی متری از دهانه نازل جتی با دو رینولدز ۵۰۰۰ و ۱۰۰۰۰ در محیطی با اکسیژن ۳٪ برای دو حالت اعمال و عدم اعمال مدل توربولانسی (آزمایشهای شماره ۱، ۳، ۶ و ۷ جدول ۱)



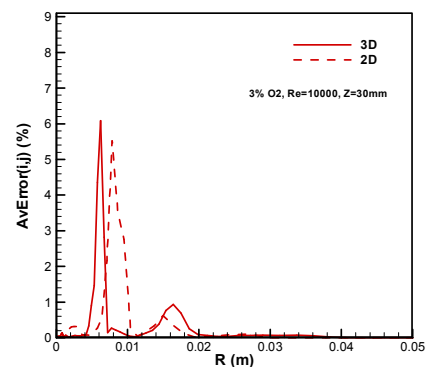
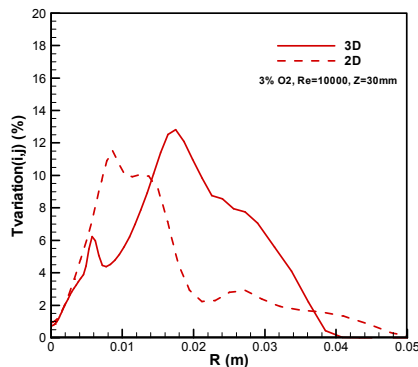
شکل ۹- مقایسه توزیع شعاعی پارامترهای $Tvariation_{(i,j)}$ و $AvError_{(i,j)}$ در فاصله ۳۰ و ۶۰ میلی متری از دهانه نازل جتی در محیطی با اکسیژن ۳٪ در دو $Re=5000$ و $Re=10000$ (آزمایشهای شماره ۱، ۳، ۶ و ۷ جدول ۱)



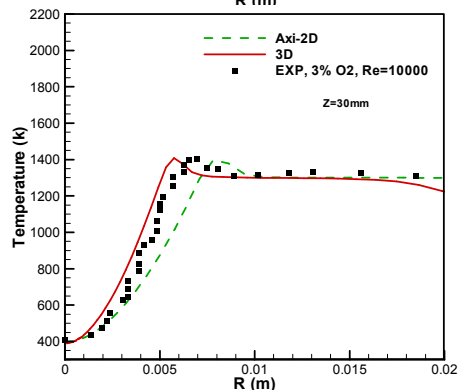
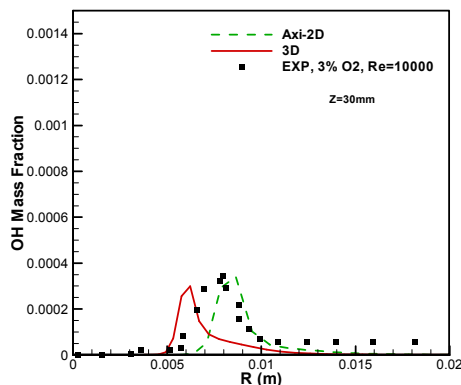
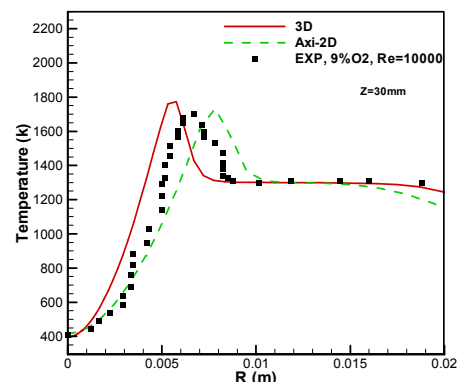
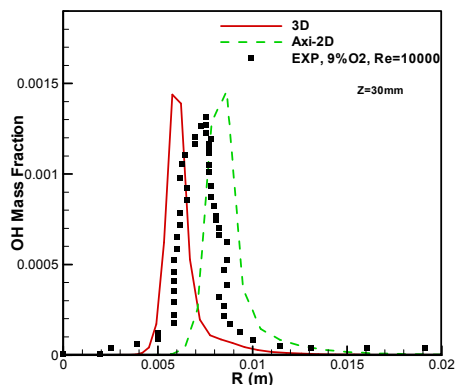
شکل ۱۰- مقایسه توزیع شعاعی رادیکالهای H_2CO , OH و HCO در فاصله ۳۰ میلی متری از دهانه نازل جتی در محیطی با ۳٪ اکسیژن در دو رینولدز ۵۰۰۰ و ۱۰۰۰۰ (آزمایشهای شماره ۱ و ۶ جدول ۱)

۴- مدل سازی سه بعدی:

با توجه به سه بعدی بودن پدیده توربولانس و نقشی که در محاسبه نرخ واکنشهای شیمیایی دارد، در ادامه به مقایسه برخی از نتایج مدل سازی دوبعدی-متقارن محوری و سه بعدی پرداخته شده است. شکل ۱۱ تغییر پارامتر $AvError_{(i,j)}$ و $Tvariation_{(i,j)}$ در دو حالت سه بعدی و دوبعدی برای حالت ۳٪ اکسیژن را مقایسه نموده است. مشاهده می شود که بین دو نمودار از لحاظ کیفی و حداکثر مقدار انطباق وجود دارد اما مقداری جابجایی بین آنها وجود دارد که به علت اختلاف در پیش بینی گسترش جت در حالت متقارن-محوری و سه بعدی ایجاد شده است.



شکل ۱۱- مقایسه توزیع شعاعی پارامترهای $T\ variation_{(i,j)}$ و $AvError_{(i,j)}$ در فاصله ۳۰ میلی متری از دهانه نازل برای جتی با $Re=10000$ در محیطی با اکسیژن ۳٪ در دو حالت مدلسازی سه بعدی و متقارن محوری (آزمایشهای شماره ۴، ۵، ۸ و ۹ جدول ۱) مقایسه توزیع شعاعی دما و گونه OH در دو حالت محاسبات دوبعدی و سه بعدی با نتایج تجربی برای دو حالت ۳ و ۹٪ اکسیژن و رینولدز ۱۰۰۰۰ در فاصله ۳۰ میلی متری از دهانه نازل در شکل ۱۲ نشان داده شده است. این شکلها نشان می دهند که محاسبات سه بعدی محل حداکثر دما و گونه Oh را در فاصله نزدیکتری از محور شعله نشان می دهد در حالیکه مدلسازی دو بعدی کمی دورتر از محل واقعی پیش بینی می نماید. همچنین شکل ۳ بیانگر این مطلب است که در مدلسازی سه بعدی اگر چه به نظر می رسد نتایج کمی از نتایج تجربی دورتر هستند ولی فیزیک جریان بهتر از حالت دو بعدی پیش بینی گردیده است. در مجموع می توان گفت که مدلسازی سه بعدی در داخل جت نتایج بهتری نسبت به حالت دو بعدی ارائه می کند.



شکل ۱۲- مقایسه توزیع شعاعی دما و رادیکال OH در فاصله ۳۰ mm از دهانه نازل برای جتی با $Re=10000$ در محیطی با اکسیژن ۳٪ در دو حالت مدلسازی سه بعدی و متقارن محوری با نتایج آزمایشگاهی (آزمایشهای شماره ۱، ۲، ۴ و ۸ جدول ۱)



FCCI2010-1211



دانشگاه صنعتی امیرکبیر
دانشکده مهندسی هوافضا

۵- جمع‌بندی:

در تحقیق جاری میزان نوسانات پارامترهای میدان جریان در احتراق Mild مطالعه شده است. بدین منظور در مدل‌سازی این رژیم احتراقی به وسیله معادلات RANS به ترم نرخ تولید و مصرف گونه‌های شیمیایی توجه شده است. اعمال و عدم اعمال مدل توربولانسی EDC در ایجاد ارتباط بین شیمی واکنشها و آشفستگی جریان منجر به ایجاد اختلاف در نتایج مدل‌سازی می‌گردد که به وسیله دو پارامتر $AvError_{(i,j)}$ و $T\ variation_{(i,j)}$ ارزیابی شده است.

نتایج حاکی از آن است ترم‌های نوسانی در مقایسه با ترم‌های متوسط در معادله نرخ تولید و مصرف گونه‌های شیمیایی حداکثر حدود ۱۲ درصد می‌باشد (در سیستم جاری) و این ترم‌ها در محل حداکثر دما که در آن نرخ واکنشها حداکثر می‌باشند، دارای اهمیت بیشتری می‌باشند.

با کاهش درصد اکسیژن در جریان هوای پیش گرم شده بر اهمیت ایجاد رابطه مناسب بین شیمی واکنشها و آشفستگی جریان افزوده می‌گردد. یعنی به عبارت دیگر در درصد اکسیژن کمتر ترم‌های نوسانی نقش موثری در انجام واکنشها نسبت به حالت‌هایی که در آنها اکسیژن بیشتری در میدان وجود دارد، ایفا می‌کنند. مشاهد گردید که با کاهش در صد اکسیژن در اثر کاهش نرخ آزاد سازی انرژی ویسکوزیته توربولانسی و در نتیجه نرخ استهلاک اغتشاشات کاهش یافته و قدرت آرام سازی جریان توسط واکنشهای شیمیایی کاهش خواهد یافت. نتیجه این امر افزایش تاثیرگذاری اغتشاشات در میدان جریان می‌باشد. با افزایش رینولدز جت ورودی به محفظه و ثابت نگه داشتن نسبت اغتشاشات مشاهده شد که شدت واکنشها و آزادسازی انرژی و غلظت گونه‌های میانی و همچنین خطا در محاسبه دمای شعله در اثر عدم اعمال مدل توربولانسی در محاسبه نرخ تولید و مصرف اجزاء شیمیایی افزایش می‌یابند. علی‌رغم این مطلب دمای ماکزیمم میدان به مقدار کمی در رینولدزهای کمتر، بالاتر است. عدم ایجاد رابطه مناسب بین شیمی واکنش و آشفستگی میدان در رینولدزهای بالاتر منجر به خطای کمتری در محاسبه نرخ تولید و مصرف اجزاء می‌گردد که احتمالاً ناشی از قدرت آرام‌کنندگی بالاتر جریان واکنشی در اثر نرخ آزاد سازی انرژی بالاتر می‌باشد.

مدلسازی سه بعدی کامل نیز در تحقیق صورت گرفت و نتایج آن با نتایج حل متقارن محوری مقایسه شد. نتایج حاکی از آن است پارامترهای خطای تعریف شده در این مقاله مقدار مشابهی در هر دو مدلسازی دارند. اما در پیش بینی مکان جبهه شعله بین هر دو مدلسازی مقداری تفاوت وجود دارد. مدلسازی سه بعدی محل حداکثر دما را در فاصله نزدیکتری از محور شعله پیش بینی می‌کند و در مقایسه با نتایج تجربی می‌توان گفت که حل سه بعدی فیزیک میدان را مخصوصاً در توزیع mixture fraction از لحاظ کیفی بهتر از حالت متقارن محوری پیش بینی نموده است. همچنین در داخل جت نیز نتایج مدلسازی سه بعدی ارجحیت دارد. هر چند شاید بتوان بخشی از عدم انطباق بین نتایج تجربی و محاسباتی را به عدم انطباق کامل شرایط مدلسازی و آزمایشات در اثر فقدان اطلاعات بسیار دقیق بیانگر شرایط آزمایشها و همچنین خطای آزمایشگاهی نسبت داد. اما حل سه بعدی کامل بر حل متقارن محوری ارجحیت داشته و نتایج بهتری را ارائه می‌نماید.

بطور خلاصه می‌توان گفت مشخصات خاص رژیم احتراقی Mild نظیر کاهش نوسانات دمایی و آرام بودن واکنشها و گسترده و یکنواخت بودن منطقه واکنش منجر به کاهش اهمیت خواص نوسانی میدان جریان نمی‌شود و عواملی مانند کاهش درصد اکسیژن، کاهش رینولدز جریان که منجر به یکنواخت شدن میدان دمایی و منطقه واکنش در این رژیم احتراقی می‌شوند موجب کوچکتر شدن اثر ترم‌های نوسانی در نرخ تولید و مصرف گونه‌های شیمیایی نشده و در صورت عدم ایجاد رابطه مناسب بین آشفستگی جریان و شیمی واکنش خطای محاسباتی مخصوصاً در پیش بینی غلظت گونه‌های شیمیایی افزایش خواهد یافت.

۶- منابع:

- 1- A. K. Gupta, and Z. Li, "Effect of Fuel Property on the Structure of Highly Preheated Air Flames, Proc.Intl. Joint Power Generation Conference", ASME EC- vol. 5(1997), pp. 247-258.



- 2- A. K. Gupta, "Flame characteristics and challenges with high temperature air combustion", *Proc. of Intl. Joint Power Generation Conference (IJPGC)*, Miami, Florida, 2000.
- 3- A. Cavaliere, M. D. Joannon, "Mild Combustion", *Prog. Energy Combust. Sci.* 30(2004), pp.329-366
- 4- Ito, Y., Gupta, A.K., Yoshikawa, K., and Shimo, N. (2002) "Combustion characteristics of low calorific value gas with high temperature and low-oxygen concentration air", *Proc.5th HiTAC & Gasi. Conf., Japan.*
- 5- Tsuji, H., Gupta, A.K., Hasegawa, T., Katsuki, K., Kishimoto K., and Morita, M. (2003) "High Temperature Air Combustion: From Energy Conservation to Pollution Reduction", CRC Press, Boca Raton, FL.
- 6- Mortberg, M., Blasiak, W., and Gupta, A.K. (2006) "Experimental investigation of flow phenomena of a single fuel jet in cross-flow during highly preheated air combustion conditions". *ASME J. Gas Tu. &Power*
- 7- Gupta, A.K., (2002b) "Flame length and ignition delay during the combustion of acetylene in high temperature air". *Invited paper, Proc.5th high temperature air combustion & gasification conf, Japan.*
- 8- Mortberg, M., Blasiak, W., and Gupta, A.K. (2005a) "Flameless combustion of methane fuel jet injected into transverse high temperature air flow". *Proc. 6th Intl. Conference on High Temperature Air Combustion and Steam Gasification (HTACG)*, Essen, Germany, October 17 19.
- 9- M. Katsuki, T. Hasegawa, "The Science and Technology of Combustion in Highly Preheated Air", 27 *Symposium on Combustion/The Combustion Institute (1998)*, pp. 3135-3146.
- 10- T. Plessing, N. Peters and J. G. Wunning, "Laser Optical Investigation of Highly Preheated Combustion with Strong Exhaust Gas Recirculation", 27 *Symp. on Comb./The Comb. Institute(1998)*, pp 3197-3204.
- 11- P.J. Coelho, N.Peters, "Numerical Simulation of a Mild Combustion Burner", *Comb.&Flame* 124(2001), pp:503-518.
- 12- W.Yong, D.Wei, W.Blasiak, "Mathematics Modeling for High Temperature Air Combustion(HiTAC)", *Summary Final Report, Royal Institute of Technology(KTH), (2003) TO 51-35*
- 13- F. C. Christo, B. B. Dally, "Modeling Turbulent Reacting Jets Issuing into a Hot and Diluted Coflow", *Combustion and Flame*, 142(2005), pp. 117-129
- 14- I.R. Gran and B. F. Magnussen, "A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame". part 2. influence of combustion modeling and finite-rate chemistry,. *Comb. Science and Tech.* (1996), pp.119:191.
- 15- Galletti C., Parente A., Tognotti L., (2007) "Numerical and Experimental Investigation of a MILD Combustion Burner", *Combustion and Flame*, CFN:68
- 16- A. Parente, C. Galletti, L. Tognotti, "Effect of the combustion model and kinetic mechanism on the MILD combustion in an industrial burner fed with hydrogen enriched fuels", *international journal of hydrogen energy* 33 (2008), pp 7553 – 7564
- 17- J. G. Wunning, "Flameless Combustion in Thermal Process Technology", 2th *Inter. HTAC, Sweden, 2000*
- 18- J.Warnatz, U.Mass, R.W.Dibble, 'Combustion', *springer, Germany, 1996*
- 19- B. B. Dally, A. N. karpets, R. S. Barlow, (2002) "Structure of Turbulent Non-Premixed Jet Flames in a Diluted Hot Coflow", *proceeding of the Combustion Institute*, 29, pp:1147-1154
- 20- Rahman, M.M., Miettinen, A. and Siikonen, T. (1996) "Modified Simple Formulation on a Collocated Grid with an Assessment of the Simplified Quick Scheme", *Numerical Heat Transfer, Part B*, 30:3, 291 — 314
- 21- A. Kazakov, M. Frenklach, "Reduced reaction sets based on GRIMEch1.2", Available at <http://www.me.berkeley.edu/drm/>.
- 22- M. Frenklach, H. Wang, C-L Yu, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, et al. "GRI-1.2.", Available at http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- 23- G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, et al., "GRI-3.0.", Available at http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.



FCCI2010-1211

سومین کنفرانس سوخت و احتراق ایران

تهران - دانشگاه صنعتی امیرکبیر - اسفند ماه ۱۳۸۸



دانشگاه صنعتی امیرکبیر
دانشکده مهندسی هوافضا

- 24- C.T. Bowman, R.K.Hanson, D.F. Davidson, W.C.Gardiner, Jr., V.Lissianski, G.P. Smith, D.M.Golden, M.Frenklach, and M. Goldenberg, "GRI-2.11.", Available at http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/ (1995).
- 25- Fluent Inc. Docs, January 28, 2003, page:13 10
- 26- R.W. Bilger, S. H. Starner And R. J. Kee, "On Reduced Mechanisms for Methane-Air Combustion in Nonpremixed Flames", *Combust. Flame* 80 (1990) 135-149.
- 27- K.K. Kuo, "Principle of Combustion", wiley, 1986
- 28- P. R. Medwell, P. A.M. Kalt, B. B. Dally, "Simultaneous imaging of OH, formaldehyde, and temperature of turbulent nonpremixed jet flames in a heated and diluted coflow", *Combust. Flame* 148 (2007) 48-61.
- 29- K. Kohse-Höinghaus, J.B. Jeffries, "Applied Combustion Diagnostics", Taylor & Francis, New York, 2002.
- 30- R. Bombach, B. Käppeli, *Appl. Phys. B* 68 (1999) 251-255.
- 31- H.N. Najm, P.H. Paul, C.J. Mueller, P.S. Wyckoff, "On the Adequacy of Certain Experimental Observables as Measurements of Flame Burning Rate", *Combust. Flame* 113 (1998) 312-332.