

## بررسی اثر مدل اغتشاشی در شبیه‌سازی عددی شعله جت مغشوش با مدل احتراقی فلیملت

فائزه احسانی درخشان

دانشجوی دکتری تبدیل انرژی-دانشگاه تربیت مدرس  
f.ehsaniderakhshan@modares.ac.ir

کیومرث مظاهری\*

استاد گروه تبدیل انرژی-دانشگاه تربیت مدرس  
kiumars@modares.ac.ir

### چکیده

شبیه‌سازی شعله مغشوش غیرپیش‌آمیخته با مدل احتراقی فلیملت به منظور بررسی ساختار شعله و مقایسه‌ی مدل‌های اغتشاشی انجام گرفته است. جهت افزایش دقت مدل احتراقی، در شبیه‌سازی فلیملت‌ها از مکانیزم جزئی استفاده شده، و فلیملت‌ها در نرخ استهلاک اسکالر از ۰.۰۴ تا محدوده‌ی خاموشی برابر با ۱۶۱، در کد متن باز کنترتا تولید شده است. نمودار شاخه احتراق پایدار فلیملت رسم شده که نشان‌دهنده بازه‌ی صحیح فلیملت‌ها می‌باشد. طبق نتایج به دست آمده، مدل کی-اِپسیلون اصلاح شده به دلیل پیش‌بینی صحیح‌تر میدان سرعت و میدان کسر مخلوط، نتایج دقیق‌تری نسبت به دو مدل دیگر بخصوص در نزدیکی نازل سوخت نشان می‌دهد. در نتایج مشاهده شد که خطای ایجاد شده در محاسبه‌ی میدان سرعت و کسر مخلوط، باعث ایجاد خطا در محاسبه‌ی میدان دما می‌شود. بنابراین تنظیم صحیح پارامترهای حل جریان و شبیه‌سازی عددی دقیق آن، تاثیر زیادی بر نتایج میدان احتراقی دارد. مقدار دمای حداکثر در مقاطع مختلف به خوبی پیش‌بینی شده و فرض عدد لوییس برابر با ۱ ایجاد خطای قابل ملاحظه‌ای ایجاد نکرده است.

**کلمات کلیدی:** شبیه‌سازی عددی احتراق، مدل فلیملت، مدل‌سازی اغتشاش، شعله غیرپیش‌آمیخته.

### مقدمه

احتراق ترکیبی از فرایندهای بسیار پیچیده‌است که در طی آن، واکنش-دهنده‌ها شامل سوخت و اکسیدکننده، ترکیب شده و به همراه آزاد شدن انرژی، محصولات جدیدی نیز پدید می‌آید. اهمیت مشخصه‌های احتراق با سوخت‌های فسیلی، به دلیل اهمیت تامین منبع آن و کنترل آلاینده‌ها، بر کسی پوشیده نیست. در زمینه‌ی شناخت ساختار شعله کارهای تجربی و عددی بسیاری انجام گرفته است و با این وجود، جنبه‌های ناشناخته زیادی در این زمینه وجود دارد. چالش‌هایی همچون اندرکنش واکنش‌های پیچیده‌ی شیمیایی، پدیده‌های انتقال و نفوذ، اثر پدیده‌های اغتشاش و تشعشع و تاثیر پدیده‌های اغتشاش و واکنش‌های شیمیایی بر همدیگر، مطالعه‌ی پدیده احتراق را پیچیده می‌کنند و هنوز در حال بررسی و توسعه هستند. بنابراین به دلیل کاربری گسترده، و پیچیدگی ذاتی و اهمیت بهینه‌سازی، مطالعه‌ی این آثار از ارزش زیادی برخوردار است. با توجه به محدودیت مطالعه پارامترها، مشکلات اندازه‌گیری و هزینه‌بر بودن آزمایش-های تجربی، مطالعات عددی روشی پیشرو در بررسی‌های علمی به شمار می‌رود. در روش‌های عددی، جزئیات بیشتری قابل استخراج هستند و تاثیر تغییر پارامترهای هندسی و جریان و اصلاح آن‌ها ساده‌تر اعمال می‌شود. در عین حال با صرف هزینه‌ی کمتری می‌توان به این نتایج دست یافت [۱]. مدل کردن شعله جت ساده مغشوش دارای چالش‌های مخصوص به خود است. در این شعله‌ها سوخت و اکسیدکننده به صورت جداگانه تزریق می‌شود و سطح شعله، جداکننده دو جریان می‌باشد. اختلاط به وسیله‌ی کانوکشن و دیفیوژن در سطح مولکولی ایجاد و یک مخلوط

استوکیومتریکی به صورت محلی تولید می‌شود و احتراق صورت می‌پذیرد. به دلیل کوچک بودن مقیاس زمانی واکنش نسبت به اختلاط، اختلاط تعیین‌کننده‌ی سرعت فرایند است. در کاربردهای صنعتی، احتراق تنها به صورت مغشوش قابل استفاده است زیرا به منظور افزایش توان حرارتی شعله، لازم است تا نرخ اختلاط افزایش یابد و اغتشاش با افزایش سطح تماس سوخت و اکسید کننده اختلاط را بیشتر می‌کند [۲]. مسئله‌ی احتراق مغشوش ترکیبی است از واکنش‌های شیمیایی، انتقال جرم و حرارت، اغتشاش، تغییر فاز و تشعشع که تحلیل تمامی این پدیده‌ها چالشی بزرگ به شمار می‌رود. در روش‌های شبیه‌سازی عددی، بخشی از این پدیده‌ها مدل شده و از بخشی نیز بسته به شرایط فیزیک مسئله صرف‌نظر می‌شود. یکی از چالش‌برانگیزترین بخش‌های حل جریان احتراقی مغشوش، در نظر گرفتن اندرکنش بین واکنش‌های شیمیایی و اغتشاش جریان است که به این منظور روش‌های متعددی تا به امروز ارائه شده است. مدل‌هایی همچون "مخلوط می‌شود-می‌سوزد"، تعادل شیمیایی و مدل فلیملت آرام، مدل فلیملت که در کار حاضر مورد استفاده قرار گرفته است، بر اساس جدا کردن حل اغتشاش و واکنش‌های شیمیایی، و سپس ارتباط دادن آن‌ها به یکدیگر با چند متغیر محدود می‌باشد. مبنای مدل فلیملت، مدل شعله صفحه‌ای است که حل آن در سال ۱۹۲۸ توسط بورک و شومان ارائه شد [۳]. اما لیو و همکارانش نخستین کسانی بودند که استفاده از شعله‌های نازک در مدل‌سازی شعله مغشوش را در سال ۱۹۸۱ پیشنهاد دادند [۴]. پیترز در سال ۱۹۸۴ معادلات دما و کسر جرمی گونه-ها برای یک فلیملت را با استفاده از تبدیل مختصات کروکو و انتقال معادلات به فضای کسر مخلوط و فرض گرادیان بیشینه در جهت عمود بر سطح شعله، در فضای کسر مخلوط استخراج نمود. او اثر انحراف از حالت تعادلی را با معرفی کمیت نرخ استهلاک اسکالر در نظر گرفت. این پارامتر همچنین به طور ضمنی تاثیر جابجایی و نفوذ عمود بر سطح کسر مخلوط استوکیومتری را نشان می‌دهد [۵]. سپس در ۱۹۸۶ مفاهیم مدل فلیملت پایا برای شعله‌های پیش‌آمیخته و غیرپیش‌آمیخته توسط پیترز ارائه شد [۶].

در مدل احتراقی فلیملت، شعله مجموعه‌ای از شعله‌های آرام دیفیوژنی به نام فلیملت فرض می‌شود که در هر فلیملت، دما و کسر جرمی گونه‌ها بر حسب متغیرهای کسر مخلوط و نرخ اضمحلال اسکالر به دست می‌آید. مزیت اصلی آن این است که فلیملت‌ها (که ساختار محلی شعله مغشوش را توصیف می‌کنند) و جریان مغشوش فقط با چند پارامتر به هم کوپل می‌شوند. از این مزیت استفاده می‌شود تا فلیملت‌ها مستقل از جریان مغشوش محاسبه و در کتابخانه فلیملت ذخیره شوند. بعداً می‌توان مشخصات ترمودینامیکی و کسر جرمی گونه‌ها را از این جداول با کمک پارامترهای یاد شده (که معادله انتقال برای آن‌ها نوشته شده است) استخراج کرد [۷].

از دیدگاه هزینه محاسباتی، مهم‌ترین خاصیت روش فلیملت، جدا کردن ساختار شیمیایی شعله از جریان مغشوش است. در نتیجه در مرحله‌ی حل

هاگن مولر و همکارانش، در سال ۲۰۱۳ حلگری را تحت کد اپنوم، برای شبیه‌سازی شعله‌های غیرپیش‌آمیخته با مدل فلیملت توسعه و در ورکشاپ اوپنوم ارائه دادند [۷].

پرپلر و همکارانش در سال ۲۰۱۵ امکان کاربرد مدل فلیملت را در شرایط احتراق با اکسیدکننده‌ی اکسیژن غنی بررسی کردند. در این کار شبیه‌سازی عددی یک کوره آزمایشگاهی با سوخت گاز طبیعی و درصد‌های مختلف اکسیژن در اکسیدکننده انجام گرفت. مکانیزم شیمیایی به کار رفته شامل ۱۷ گونه و ۲۵ واکنش بود. برای بستن معادلات مومنوم، مدل‌های اغتشاشی *standard-k-epsilon* و *realizable-k-epsilon* و *RSM* به کار رفت که دو مدل آخر نتایج بهتری نسبت به مدل استاندارد نشان دادند. همچنین نتایج مدل احتراقی فلیملت پایا را با نتایج شبیه‌سازی با مدل احتراقی *EDC* با مکانیزمی شامل ۱۷ گونه و ۴۶ واکنش مقایسه نمودند که هر دو روش نتایج مشابهی برای دما و کسر جرمی گونه‌ها داشتند اما هزینه محاسباتی مدل *EDC* حدود ۴ برابر مدل فلیملت تخمین زده شد [۱۴].

در سال ۲۰۱۵، کشیر و همکارانش، از مدل احتراقی فلیملت پایا و مدل اغتشاشی شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ، برای بررسی تاثیر درصد هیدروژن سوخت بر مشخصه‌های احتراق استفاده کردند. در این کار ابتدا برای مقایسه مدل‌های اغتشاشی، مشعل *DLR-A* که در مطالعه حاضر نیز بررسی شده است، شبیه‌سازی شد. نتیجه این بود که مدل شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ با شبکه‌ی مناسب نتایج بهتری نسبت به مدل *URANS* بخصوص در مقدار واریانس‌ها و در ناحیه لایه‌برشی ارائه می‌دهد. سپس با ایجاد تغییراتی در هتدسه، مانند تغییر قطر و اعمال دو عدد چرخش بر جریان هوا، مشخصه‌های شعله چرخشی معکوس *CH4-H2*، بر اساس تغییر درصد هیدروژن در سوخت و شدت چرخش جریان هوا مورد بررسی قرار گرفت. افزایش هردوی این پارامترها باعث کوتاه‌تر شدن طول شعله شد. با افزایش چرخش جریان، گردابان فشار معکوس مانع گسترش جریان سوخت به پایین دست می‌شد. همچنین مشاهده شد که افزایش درصد هیدروژن منجر به کاهش دمای ماکزیمم شعله و طول نفوذ جت می‌گردد که دلیل آن کاهش در توان حرارتی و آزادسازی حرارت احتراق، ناشی از کاهش نسبت مومنوم ورودی است [۱۵].

با مروری بر تحقیقات انجام شده مشاهده می‌شود که مدل فلیملت در مدل‌سازی مسائل مختلف احتراق مغشوش به کار رفته و نتایج قابل قبولی داشته است. در کار حاضر نیز از این مدل در کنار سه مدل اغتشاشی مختلف در پیش‌بینی ساختار شعله‌ی غیرپیش‌آمیخته مغشوش *DLR-A* استفاده می‌شود و نتایج حاصل از مدل‌های اغتشاشی مختلف در شبیه‌سازی جت مغشوش احتراقی با هم مقایسه می‌شوند.

#### مدل ریاضی مدل فلیملت

اگر طول مشخصه شعله از طول مشخصه جریان اطرافش کمتر باشد، ساختارهای اغتشاشی نمیتوانند به آن نفوذ کنند و آن را از بین ببرند و فقط باعث تغییر شکل آن می‌شوند. این شعله‌های نازک آرام فلیملت نام دارند و تغییر شکل شعله با پارامتری به نام نرخ اضمحلال اسکالر بررسی می‌شود. در این مدل احتراقی شعله مجموعه‌ای از شعله‌های آرام دیفیوژنی به نام فلیملت فرض می‌شود که در هر فلیملت، دما و کسر جرمی گونه‌ها بر حسب متغیرهای کسر مخلوط و نرخ اضمحلال اسکالر به دست می‌آید [۷]. بنابراین در شبیه‌سازی میدان جریان و احتراق، به غیر از معادلات بقای جرم و مومنوم و متغیرهای اغتشاش، فقط دو معادله انتقال اضافه،

واکنش‌های شیمیایی می‌توان از سینتیک‌های جزئی استفاده کرد. تاثیر اغتشاش روی پارامترهای احتراقی ذخیره شده در جداول فلیملت نیز با استفاده از یک تابع چگالی احتمال فرضی دیده می‌شود. در نتیجه هزینه محاسبات نسبت به مدل‌های احتراقی دیگر با سینتیک مشابه بسیار کاهش می‌یابد. البته در مدل احتراقی فلیملت پایا به دلیل حذف ترم زمانی، پدیده‌های وابسته به زمان مثل خاموشی قابل پیش‌بینی نیست. اما در نواحی از شعله که مقیاس زمانی احتراق در مقابل مقیاس زمانی اختلاط ناچیز باشد مدل فلیملت پدیده‌ها را به خوبی پیش‌بینی می‌نماید [۸].

از مدل فلیملت پایا در شبیه‌سازی احتراق در پژوهش‌های متعددی استفاده شده است. در سال ۱۹۹۷، کوک و همکارانش مدل فلیملت آرام و مدل اغتشاشی شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ را برای شعله مغشوش غیرپیش‌آمیخته به کار بردند و با استفاده از داده‌های *DNS* امکان کاربرد مدل *LES* در جریان‌های مغشوش احتراقی غیرپیش‌آمیخته با مدل فلیملت را بررسی نمودند. در این کار از مدلی برای گونه‌های شیمیایی فیلتر شده استفاده شد که مدل شیمیایی مقیاس زیرشبکه، بر اساس تئوری فلیملت بود. در این شبیه‌سازی مقدار نرخ استهلاک اسکالر به صورت تابعی از کسر مخلوط استوکیومتریک فرض شد. نشان داده شد که پیش‌بینی این مدل احتراقی نسبت به نتایج به دست آمده با مدل فرض تعادلی بسیار بهتر است. همچنین با افزایش عدد دامکهلر، دقت مدل بالا می‌رود که با توجه به نازک‌تر شدن ناحیه واکنش نتیجه‌ای منطقی می‌باشد [۹].

در سال ۲۰۰۲ سوامیناتان در مقاله‌ای محدوده‌ی اعتبار مدل فلیملت پایا در شعله‌های غیرپیش‌آمیخته را مورد بررسی قرار داد و با توجه به عدد رینولدز و عدد دامکهلر رابطه‌ای برای اعتبار مدل فلیملت ارائه نمود [۱۰]. کلارامونت و همکارانش در سال ۲۰۰۶ کاربرد مفهوم فلیملت آرام در شبیه‌سازی عددی شعله‌های آرام غیرپیش‌آمیخته را بررسی و کارایی فلیملت‌های پایا و ناپایا را تحلیل کردند. در این پژوهش فرمول‌بندی ریاضی مدل فلیملت و ساده‌سازی‌هایی را که اغلب در مدل‌های فلیملت به کار می‌رود، بررسی و چند مدل برای وابستگی نرخ اضمحلال اسکالر بر کسر مخلوط تحلیل شد. نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی شعله آرام غیرپیش‌آمیخته با مدل فلیملت با مدل احتراقی که معادلات انتقال را به طور کامل حل میکرد مقایسه و بررسی شد [۱۱].

میتانی و همکارانش تاثیر نوع مختصات بر حل شعله *DLR-A* را با مدل احتراقی فلیملت و با شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ در سال ۲۰۱۱ مورد بررسی قرار دادند. شبیه‌سازی این شعله در مختصات کارتزین و استوانه‌ای انجام گرفت که نتایج آن بیانگر پاسخ‌های بهتر با استفاده از مختصات استوانه‌ای در تعداد برابر سلول‌های شبکه بود [۱۲].

در سال ۲۰۱۲ دوازده امامی و همکارش مدل فلیملت را در شبیه‌سازی شعله جت ساده به کار بردند. در این کار پس از تولید کتابخانه فلیملت، از توابع چگالی احتمال برای در نظر گرفتن اندرکنش احتراق و اغتشاش استفاده شد و به منظور میانبایی در کتابخانه‌ی تولید شده، یک شبکه عصبی مصنوعی به کار گرفته شد. در این شبکه، مقادیر میانگین و واریانس کسر مخلوط و نرخ اضمحلال اسکالر به عنوان ورودی و کسر جرمی متوسط گونه‌ها و دما به عنوان خروجی انتخاب شدند. نتایج نشان داد که استفاده از شبکه عصبی مصنوعی به جای روش‌های عددی میانبایی موجود، علاوه بر حفظ دقت پاسخ‌ها، هزینه‌ی محاسباتی کمتری دارد [۱۳].

شامل کسر مخلوط  $Z$  و واریانس آن  $Z''$  حل می‌شود و مقادیر دما و کسر جرمی گونه‌ها از جداول پیش‌ساخته استخراج می‌گردد. معادلات حاکم برای کسر مخلوط، واریانس آن و نرخ اضمحلال اسکالر پس از متوسط‌گیری فاوره برای جریان مغشوش عبارتند از:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{Z}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} + \frac{\mu}{\sigma} \right) \frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_i} \right) \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{Z}''^2}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{Z}''^2}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} + \frac{\mu}{\sigma} \right) \frac{\partial \bar{Z}''^2}{\partial x_i} \right) + 2 \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} + \frac{\mu}{\sigma} \right) \left( \frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_i} \right)^2 - \bar{\rho} \bar{\chi} \quad (2)$$

عبارت اول و دوم سمت چپ در معادله ۲ به ترتیب مربوط به ترم ناپایا و انتقال به دلیل جابجایی می‌باشد. در سمت راست معادله ۲، عبارت اول مربوط به انتقال واریانس کسر مخلوط به دلیل نفوذ، عبارت دوم ترم تولید به دلیل گرادیان‌های مقدار متوسط اسکالر کسر مخلوط و عبارت سوم مربوط به اتلاف آن است. با این فرض که نوسان‌های کسر مخلوط متناسب با نوسان‌های اغتشاش میرا می‌شوند، نرخ اتلاف اسکالر در معادله فوق را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$\bar{\chi} = C_\chi \frac{\varepsilon}{k} \bar{Z}''^2 \quad (3)$$

و  $k$  و  $\varepsilon$  انرژی جنبشی اغتشاش و اتلاف آن هستند و ثابت  $C_\chi$  برابر ۲ است. برای ساخت جداول کتابخانه فلیملت، از حل شعله نفوذی جریان متقابل استفاده شده است. در مرحله تولید جداول، ابتدا معادلات حاکم بر شعله آرام به فضای کسر مخلوط منتقل شده و سپس از گرادیان متغیرها در راستای مماس بر شعله در مقابل گرادیان در راستای عمود بر شعله صرفنظر می‌گردد. با حل معادلات پایای دما و کسر جرمی گونه‌ها با استفاده از سینتیک شیمیایی، این مقادیر برای فلیملت‌هایی با نرخ اضمحلال اسکالر متفاوت در کتابخانه فلیملت ذخیره می‌شود. روابط مربوط به حل فلیملت‌ها با فرض عدد لوپس ۱ و صرفنظر نمودن از ترم زمانی (فرض فلیملت پایا) و تشعشع عبارتند از:

$$-\rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} = \dot{\omega}_i \quad (4)$$

$$\rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} = \frac{-1}{c_p} \sum_{i=1}^k \dot{\omega}_i h_i \quad (5)$$

$$\chi = 2D \left( \frac{\partial Z}{\partial y} \right)^2 \quad (6)$$

پروفیل نرخ استهلاک اسکالر از حل تشابهی بورک-شومان برای شعله دیفیوژنی جریان مخالف به دست می‌آید:

$$\chi = \frac{\alpha(j+1)}{\pi} \exp(-2[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z)]^2) \quad (7)$$

در کار حاضر از فرض  $\chi_{st} = \chi$  استفاده شده است. از آنجا که این جداول برای شعله آرام ایجاد شده‌اند برای اعمال تاثیر اغتشاش از توابع چگالی احتمال استفاده می‌شود و کتابخانه فلیملت بر حسب کسر مخلوط، واریانس آن و نرخ اضمحلال اسکالر، ایجاد شده و در کد محاسباتی مورد استفاده قرار می‌گیرند.

### شعله DLR-A

شعله جت ساده DLR-A با سوخت متان و هیدروژن رقیق شده با نیتروژن، برای این شبیه‌سازی به کار رفته است. این شعله در آزمایشگاه مورد بررسی قرار گرفته و متغیرهای آن به طور کامل اندازه‌گیری و ثبت شده‌اند. همچنین نوپز آن اندازه‌گیری شده و داده‌های تجربی مربوط به نوپز موجود هستند. در پژوهش حاضر داده‌های تجربی کار مهیر و همکارانش [۱۶] برای مقایسه داده‌ها مورد استفاده قرار گرفته است. ساختار این مشعل غیرپیش‌آمیخته عبارت است از نازلی به قطر  $D_{ref}$  که در تونل باد قرار گرفته است. سرعت سوخت  $U_{ref}$  و سرعت هوا

جدول ۱- متغیرهای جریان در حل احتراق غیرپیش‌آمیخته

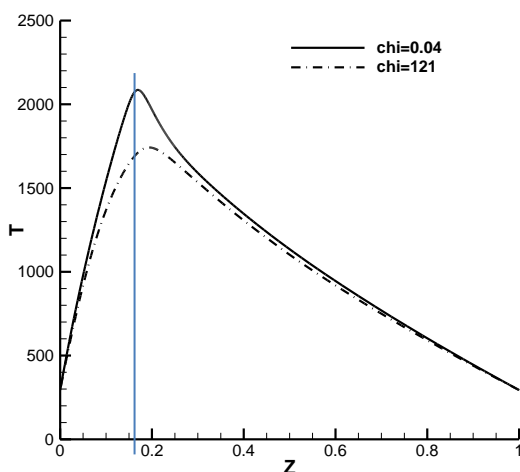
پارامتر	مقدار
$D_{ref}$	$8 \times 10^{-3}$
$U_{ref}$	42.2
$a_{ref}$	344.33
$\rho_{ref}$ (هوا)	1.169
$U_{ref}$ (سوخت)	$2.291 \times 10^{-5}$
$\alpha_{ref}$ (سوخت)	$4.710 \times 10^{-5}$
ابعاد دامنه حل	$40D_{ref} \times 120D_{ref}$

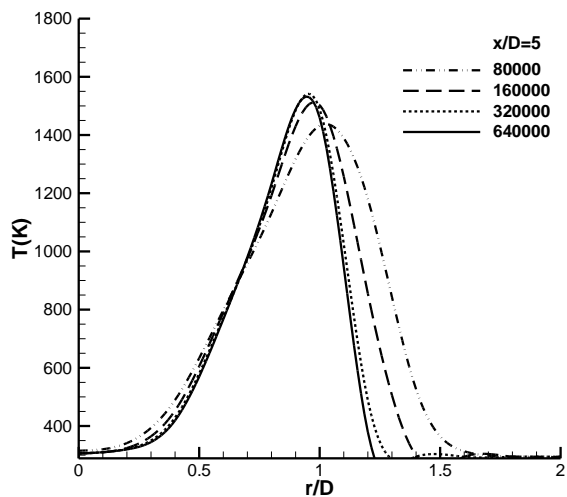
### تولید کتابخانه فلیملت

فلیملت‌ها با کد متن باز CANTERA برای شعله دیفیوژنی آرام جریان مخالف با استفاده از روابط (۴) تا (۷) از نرخ اضمحلال اسکالر  $0.04$  تا  $161$  ساخته شده‌اند. تاثیر افزایش نرخ کرنش وارد شده بر فلیملت آرام در نمودار دما بر حسب کسر مخلوط در نرخ اضمحلال  $0.04$  و  $161$  در نمودار ۱ نشان داده شده است. خط عمودی مقدار کسر مخلوط استوکیومتریکی،  $Z=0.167$  را نشان می‌دهد. افزایش نرخ استهلاک اسکالر به معنای کاهش مقیاس زمانی اختلاط است. با افزایش مقدار  $\chi$ ، غلظت واکنش‌دهنده‌ها در مخلوط بیشتر از غلظت محصولات خواهد شد و دمای حداکثر کاهش خواهد یافت. مشخصات فلیملت‌های مورد استفاده در شبیه‌سازی حاضر در جدول ۲ ارائه شده است.

جدول ۲- مشخصات فلیملت‌ها

تعداد جداول فلیملت	۵۰
محدوده نرخ اضمحلال اسکالر	$161 - 0.04$
کسر مخلوط استوکیومتریکی	$0.167$
سینتیک شیمیایی	GRI-Mech03





نمودار ۳- بررسی استقلال از شبکه در شبیه‌سازی دوبعدی متقارن محوری

در ورودی سوخت، شرط مرزی دیریکله برای سرعت به صورت پروفیل توانی با رابطه‌ی  $v = v_{max}(1 - r/1.01r)^{1/7}$  تعریف شده است. سرعت ورودی هوا یکنواخت و برابر با ۰/۳ m/s می‌باشد. در خروجی گرادیان سرعت برابر با صفر قرار داده شده است. شرط مرزی فشار نیز در ورودی برای سوخت و هوا گرادیان صفر بوده و در خروجی برابر با فشار اتمسفر است. کسر مخلوط در ورودی برای سوخت برابر با ۱ و برای هوا صفر است و در خروجی گرادیان آن صفر در نظر گرفته شده است. به منظور گسسته‌سازی ترم زمانی از روش اولر و برای ترم‌های جابه‌جایی و دیفیوژن در معادلات مومنتوم و معادله‌های کسر مخلوط و واریانس آن، از روش تقاضل مرکزی مرتبه دوم و برای کوپلینگ فشار-سرعت از الگوریتم پیزو استفاده شده است.

**مدل‌های توربولانسی**

ساختار جریان جت به این صورت است که در ابتدا جریانی با سرعت بالا وارد محیط ساکن یا کم سرعت می‌شود. به دلیل گرادیان سرعت شدید، یک لایه برشی نازک که به شدت ناپایدار است تولید می‌شود. با ایجاد نوسان‌های توربولانسی شدید در این لایه‌ی برشی، لایه در پایین دست شروع به گسترش می‌کند. این لایه‌ی برشی جریان هوا را از اطراف به داخل جت میکشد و اختلاط را افزایش می‌دهد. در نتیجه لایه برشی و جت به صورت عرضی پخش می‌شوند و سرعت جت کاهش می‌یابد. در این جریان دیفیوژن توربولانسی مومنتوم در جهت جریان ناچیز است. گرادیان فشار نیز در کار حاضر برای بستن معادلات از مدل‌سازی ترم تانسور تنش رینولدز با مدل‌های دومعادله‌ای k-ε, k-omega SST و Standard k-ε و Modified k-ε استفاده شده است. در این مدل‌ها از مفهوم ویسکوزیته موثر برای تعریف تنش رینولدز استفاده می‌شود.

$$\vartheta_t = C_\mu(k^2/\varepsilon) \tag{8}$$

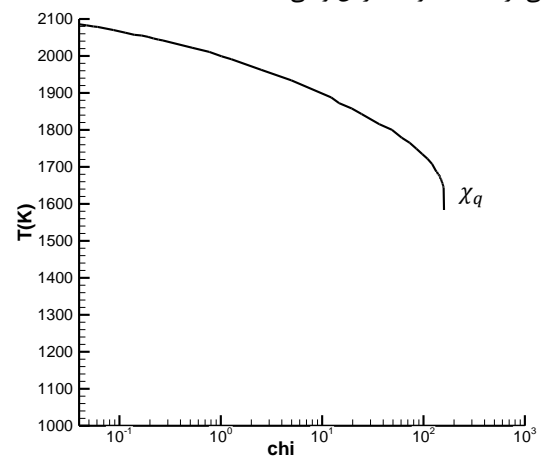
$$\overline{u'_i u'_j} = \vartheta_t \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} k \tag{9}$$

به طوری که k انرژی جنبشی اغتشاش و ε میرایی آن و بیانگر مقیاس اغتشاش می‌باشد. در نواحی از جریان جت آزاد، گردابه‌ها دچار کشیدگی می‌شوند و مقیاس طولی توربولانس را کاهش می‌دهند. کاهش مقیاس توربولانس به معنای افزایش ε است. این اثر باید در مدل توربولانسی دیده شود در غیر این صورت مقدار ε کمتر از حالت واقعی پیش‌بینی می‌شود که به این معناست که مقدار ویسکوزیته مغشوش محاسبه شده بیشتر از مقدار

**نمودار ۱- نمودار دما بر حسب کسر مخلوط برای دو فلیلمت در نرخ**

اضمحلال اسکالر اضمحلال ۰/۴ و ۱۲۱

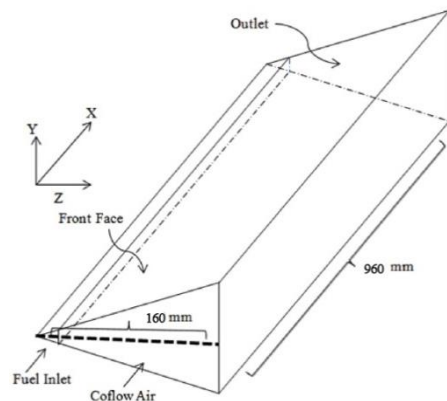
منحنی دما بر حسب نرخ اضمحلال اسکالر برای شاخه احتراق پایدار (با نرخ واکنش بالا نسبت به نرخ اختلاط) مربوط به فلیلمت‌های ساخته شده در نمودار ۲ نشان داده شده است. با افزایش اختلاط نرخ اضمحلال اسکالر افزایش می‌یابد. نقطه‌ی  $\chi_q$  مربوط به نقطه خاموشی است. یعنی اختلاط به قدری سریع اتفاق می‌افتد که واکنش‌های شیمیایی نمی‌توانند مجموعه‌ای از گونه‌های واکنش را در مقابل جریان حامل واکنش‌دهنده‌ها حفظ کنند. با رسیدن شعله به حد خاموشی، دمای محلی شعله کاهش یافته و نرخ واکنش محدود می‌شود و برای حفظ شعله لازم است که نرخ استهلاک کاهش یابد که مربوط به بخش ناپایدار منحنی است و در کار حاضر از آن استفاده نشده است. اگر  $\chi$  به صفر نزدیک شود، شرایط به حالت حل تعادلی نزدیک می‌شود. بنابراین وقتی  $\chi \rightarrow 0$ ، دما بیشینه است.



نمودار ۲- منحنی شاخه احتراق پایدار S برای شعله‌ی DLR-A

**دامنه‌ی محاسبات و شرایط مرزی**

شبیه‌سازی این شعله در هندسه دو بعدی متقارن محوری انجام شده که ابعاد میدان حل در شکل ۱ مشاهده می‌شود. دامنه‌ی حل با ۸۰۰ سلول در راستای جریان و ۴۰۰ سلول در راستای شعاعی تقسیم‌بندی شده است. همچنین به منظور حل دقیق‌تر، در نقطه‌هایی با گرادیان شدید در نزدیکی ورودی نازل، از شبکه‌های ریزتر استفاده شده است.



شکل ۱- هندسه مورد استفاده در شبیه‌سازی شعله

نتایج استقلال از شبکه برای این هندسه در نمودار ۳ ارائه شده است. توجه به نتایج، از شبکه ۳۲۰۰۰۰ سلولی برای حل استفاده شد.

فیزیکی آن است. در نتیجه مدل  $k$ -epsilon اصلاح شده و در معادله انتقال آن ضریب تولید اپسیلون بزرگتر در نظر گرفته می‌شود.

### بررسی نتایج شبیه‌سازی

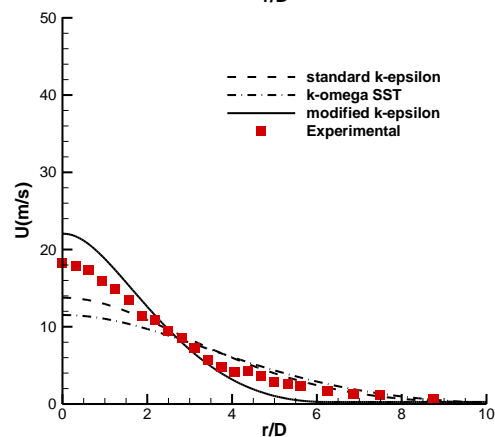
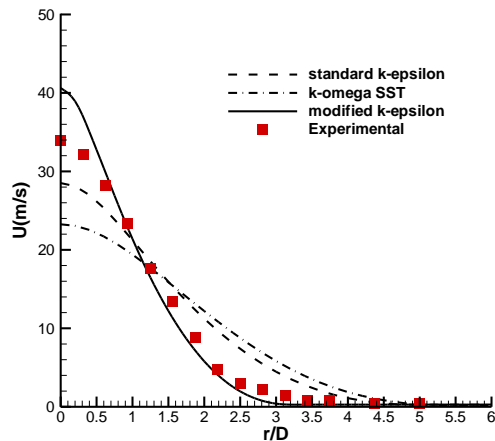
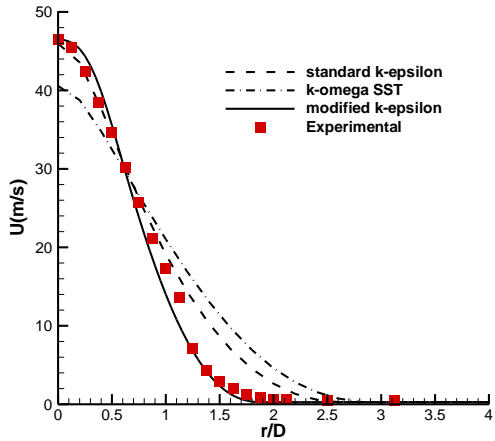
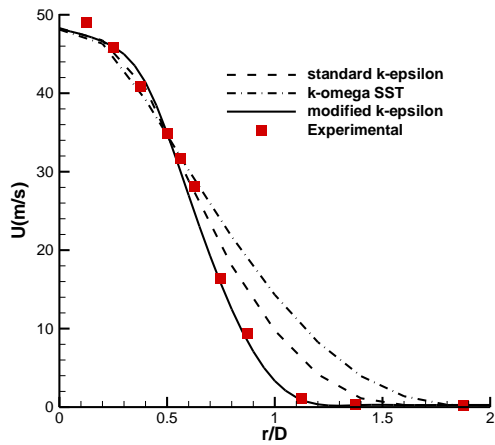
نتایج مربوط به شبیه‌سازی در مقاطع مختلف در امتداد شعله  $(x/D=5,10,20,40)$ ، با تعداد شبکه  $320000$ ، برای سرعت، کسر مخلوط و دما در نمودار ۴ و ۵ و ۶ نشان داده شده است. پارامتر  $D$  قطر نازل سوخت و  $x$  فاصله از صفحه نازل سوخت می‌باشد. در این نمودارها نتایج حاصل از شبیه‌سازی با مدل‌های اغتشاشی  $standard-k-epsilon$  و  $modified-k-epsilon$  و  $k-omega-SST$  با هم و با نتایج تجربی مقایسه شده است.

نتایج شبیه‌سازی به طور کلی نشان می‌دهد که مدل اصلاح شده  $k$ -epsilon در پیش‌بینی جریان احتراقی جت دایروی بهتر از دو مدل دیگر عمل می‌کند. بخصوص در مورد سرعت و کسر مخلوط، این مدل در نزدیکی نازل دقت خوبی دارد. همانطور که گفته شد دلیل آن در نظر گرفتن اضمحلال اغتشاش بر اثر گردابه‌های میدان جریان حاصل از گرادبان شدید سرعت در نزدیکی نازل خروجی سوخت است. در نتایج مربوط به سرعت، در  $\{20,40\} x/D \in$  دیده می‌شود که نرخ کاهش سرعت محوری و گسترش جت کمتر از مقدار تجربی پیش‌بینی شده است (سرعت در نزدیکی محور بیشتر از سرعت واقعی است). در حالی که در  $\{5,10\} x/D \in$  پیش‌بینی‌ها دقیق‌تر است. به طور کلی میزان دقت مدل‌های اغتشاشی RANS در پیش‌بینی لایه برشی کم است. با گسترش این لایه از دقت شبیه‌سازی کاسته شده و در ناحیه‌ی برشی مقدار سرعت بیشتر تخمین زده شده است. بر اساس نمودارهای سرعت می‌توان نتیجه گرفت که با گسترش جریان، مقدار لزجت توربولانسی کمتر از مقدار واقعی پیش‌بینی شده است زیرا نرخ کاهش سرعت کمتر به دست آمده است.

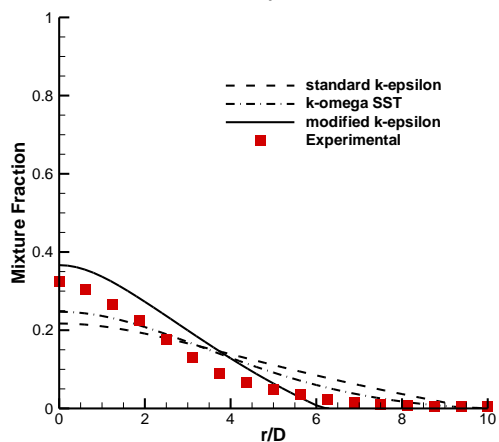
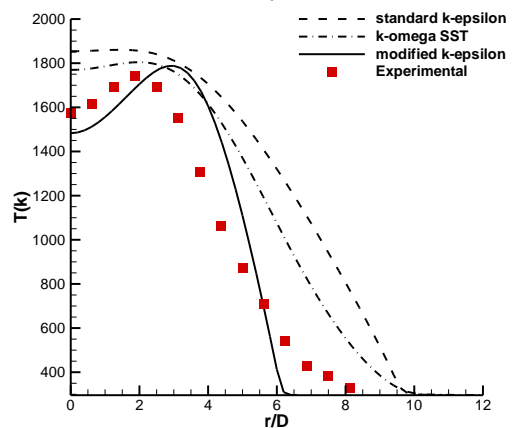
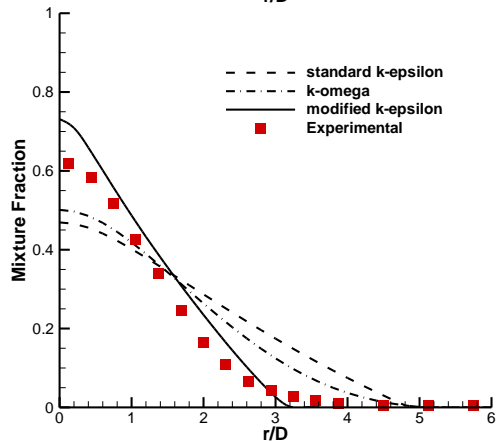
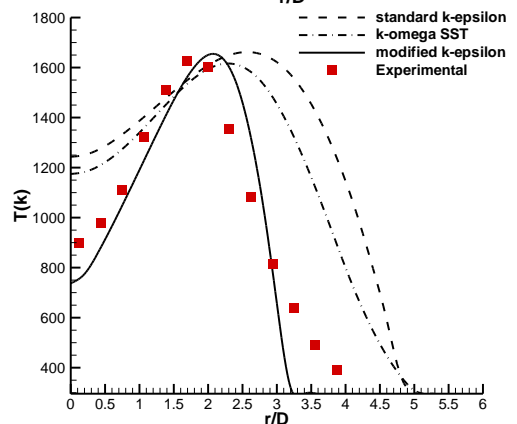
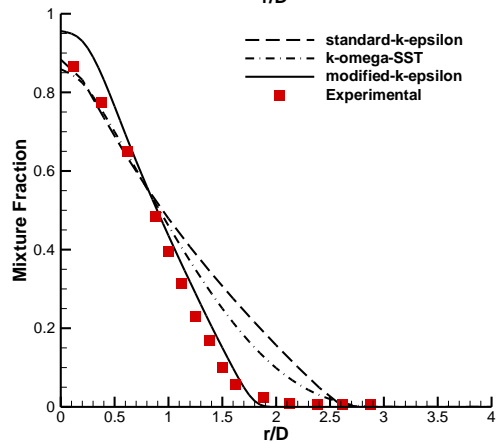
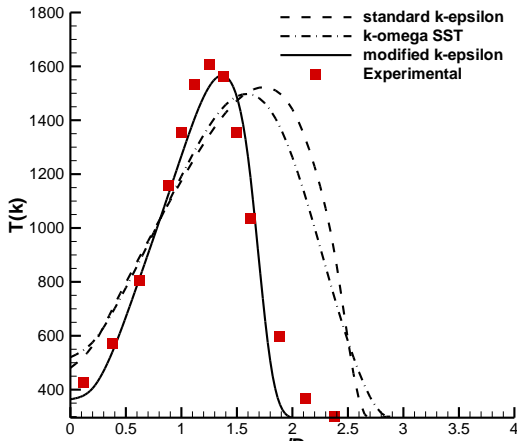
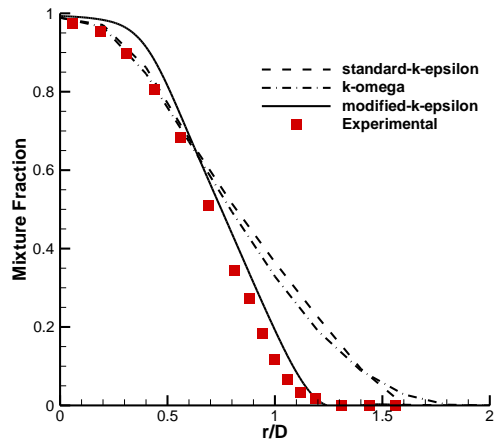
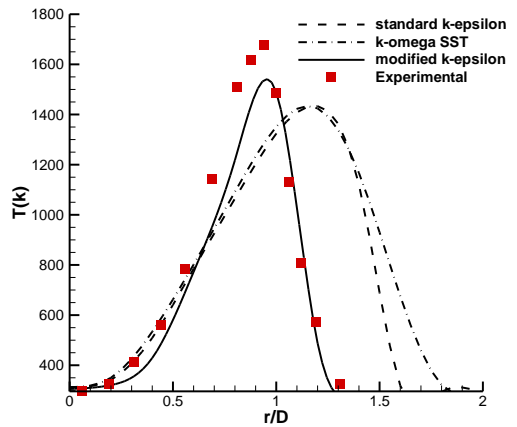
در نمودارهای کسر مخلوط دیده می‌شود که مخلوط در حالت کلی نسبت به حالت تجربی غنی نسبت به سوخت پیش‌بینی شده است. با توجه به اینکه معادله کسر مخلوط ترم چشمه نداشته و فقط شامل ترم‌های زمانی، جابجایی و نفوذ است، مهمترین عامل تاثیرگذار بر این پدیده ضریب نفوذ خواهد بود که با افزایش شدت اغتشاش، مقدار آن افزایش می‌یابد. با افزایش این ضریب، مقدار بیشتری برای کسر مخلوط پیش‌بینی خواهد شد. با بررسی انرژی جنبشی اغتشاش مشخص شد که در مقاطع مختلف شعله در شبیه‌سازی، مقدار آن بیشتر از مقادیر تجربی پیش‌بینی شده است که این امر می‌تواند دلیل تخمین بالاتر ضریب نفوذ مغشوش شود.

بیشترین خطا در مقدار کسر مخلوط روی محور جریان است که با توجه به نتایج مربوط به سرعت محوری در شبیه‌سازی عددی و پیش‌روی بیشتر سوخت در جهت محور، افزایش کسر مخلوط در نزدیکی محور طبیعی می‌باشد.

نقطه‌ای که کسر مخلوط کاهش ناگهانی دارد و مخلوط رقیق‌تر از حالت تجربی پیش‌بینی می‌شود، نقطه‌ای است که واریانس کسر مخلوط در آن نزدیک صفر به دست آمده است. انتظار می‌رود در نمودار دما نیز در این نقطه گرادبان شدیدی ایجاد شود.



نمودار ۴- مقایسه نتایج حل عددی و اندازه‌گیری تجربی سرعت شعله نمودار ۴- به ترتیب در  $x/D=5,10,20,40$



نمودار ۶- مقایسه نتایج حل عددی و اندازه گیری تجربی دمای شعله  
DLR-A به ترتیب در  $x/D=5,10,20,40$

نمودار ۵- مقایسه نتایج حل عددی و اندازه گیری تجربی کسر مخلوط  
شعله DLR-A به ترتیب در  $x/D=5,10,20,40$

- simulation", 8th International OpenFOAM workshop, Korea.
- 8-Chen, L.W., Ihme, M., Flamelet regime characterization for non-premixed turbulent combustion simulations, 2017, *Combustion and Flame*, **186**:220-235.
- 9-Cook, A.W., Riley, J.J., Kosaly, G., A laminar flamelet approach to subgrid-scale chemistry in turbulent flows, 1997, In *Combustion and Flame*, **109**:332-341.
- 10-Swaminathan, N., Flamelet regime in non-premixed combustion, 2002, In *Combustion and Flame*, **129**: 217-219.
- 11-Claramunt, K., Consul, R., Carbonell, D. and Perez-Segarra, C.D., Analysis of the laminar flamelet concept for nonpremixed laminar flames, 2006, *Combustion and Flame*, **145**: 845-862.
- 12- Mitani, M., Ito, Y. and Yamasaki, N. J., Large eddy simulation of methane non-premixed flame using the laminar flamelet model, 2011, In *Journal of Thermal Science*, **20**: 534-542.
- 13- Emami, MD., Eshghinejad, A., Laminar flamelet modeling of a turbulent CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> jet diffusion flame using artificial neural networks, 2012, In *Applied Mathematical Modelling*, **36**: 2082-2093.
- 14- Prieler, R., et al., Numerical investigation of the steady flamelet approach under different combustion environments, 2015, In *Fuel*, **140**: p. 731-743.
- 15- Kashir, B., Tabejamaat, S. and Jalalatian, N., On large eddy simulation of blended CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub> swirling inverse diffusion flames: The impact of hydrogen concentration on thermal and emission characteristics, 2015, In *International Journal of Hydrogen Energy*, **40**: 15732-15748.
- 16- Meier, W., Barlow, R.S., Chen, Y.L. and Chen, J.Y., 2000, Raman/Rayleigh/LIF Measurements in a turbulent CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> jet diffusion flame: experimental techniques and turbulence-chemistry interaction, *Combustion and Flame*, **123**:326-343.

خطا در محاسبه‌ی کسر مخلوط، میدان‌های دما و چگالی را به شدت تحت تاثیر قرار می‌دهد. زیرا کوپلینگ شدیدی بین دما و کسر مخلوط وجود دارد و خطاهای موجود در کسر مخلوط باعث تشدید خطا در دما و چگالی می‌شود. به همین دلیل در ناحیه‌ی پایین دست یعنی  $x/D \in \{20,40\}$  انحراف دما از مقادیر تجربی بیشتر شده است. اما در حالت کلی با توجه به نمودارهای دما، نتایج شبیه‌سازی از دقت قابل قبولی برخوردار بوده و بخصوص با مدل اغتشاشی *modified-k-epsilon*، نتایج به نتایج تجربی نزدیک می‌باشند.

با فاصله گرفتن از نازل، اغتشاش جریان هم بیشتر می‌شود و عامل کنترل کننده‌ی پدیده‌ها، ادی‌ها خواهد بود. اما در نزدیکی نازل، اثر دیفیوژن دیفرانسیلی از اهمیت بیشتری برخوردار است. با توجه به اینکه در  $x/D \in \{5,10\}$  پاسخ دما دقت خوبی دارد، می‌توان نتیجه گرفت که فرض عدد لوییس ۱ با حالت تجربی تطابق داشته است.

### نتیجه‌گیری

در مطالعه‌ی حاضر، شعله‌ی مغشوش غیرپیش‌آمیخته‌ی DLR-A که سوخت آن ترکیبی از متان، هیدروژن و نیتروژن است مورد بررسی قرار گرفت. بررسی ساختار این شعله با کمک مدل احتراقی فلیمیت در کنار سه مدل اغتشاشی *k-omega SST*، *k-epsilon* Standard و *Modified k-epsilon* با هدف مشاهده‌ی تاثیر مدل اغتشاشی بر ساختار جریان جت احتراقی مغشوش انجام شد. به منظور افزایش دقت مدل احتراقی، در شبیه‌سازی فلیمیت‌ها از مکانیزم GRI-MECH3.0 و برای تولید فلیمیت‌ها از کد CANTERA استفاده شد. طبق نتایج به دست آمده، مدل *k-epsilon* اصلاح شده نتایج دقیق‌تری نسبت به دو مدل دیگر بخصوص در نزدیکی نازل سوخت ارائه داد. در نتایج مشاهده شد که خطای ایجاد شده در محاسبه‌ی کسر مخلوط، باعث تشدید خطا در محاسبه‌ی دما می‌شود. یکی از دلایل ایجاد خطا در میدان کسر مخلوط عدم پیش‌بینی صحیح جریان سرعت است. بنابراین شبیه‌سازی میدان جریان تاثیر زیادی بر نتایج میدان احتراقی دارد. فرض عدد لوییس برابر با ۱ باعث ایجاد خطای قابل ملاحظه‌ای نشده است.

### مراجع

- 1- Broeckhoven, T., Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion: Numerical Study and Applications, 2007, PhD thesis, In Vrije Universiteit Brussel.
- 2-Pitsch, H., Large-Eddy Simulation of Turbulent Combustion, 2006, In *Annual Review of Fluid Mechanics*, **38**:453-82.
- 3-Burke, S.P., Schumann, T.E.W., Diffusion flames, 1928, In *First Proceedings of the Combustion*,.
- 4-Liew, S.K., Bray, K.N.C., Moss, J.B. , A flamelet model of turbulent non-premixed combustion, 1981, In *Combustion Science and Technology*, **27**:69-73.
- 5-Peters, N., Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, 1984, *Prog. Energy Combustion Science*, **10**: 319-339.
- 6-Peters, N., Laminar flamelet concepts in turbulent combustion, 1986, In *21st Symposium on Combustion*, The Combustion Institute, 1231-1250.
- 7-Muller, H., Ferraro, F. and Pfitzner, M., 2013, "Implementation of a steady laminar flamelet model for non-premixed combustion in LES and RANS