

بررسی اثرات نفوذ مولکولی و غنی‌سازی با هیدروژن بر شعله‌ی چرخشی طبقه‌ای

امیررضا محمدپور^۱، کیومرث مظاهری^{۲*}، علیرضا علی‌پور^۳، سجاد رحیمی^۴

۱- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ar.mohammadpour@modares.ac.ir

۲- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، kiumars@modares.ac.ir

۳- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه شیراز، شیراز، a.alipoor@shirazu.ac.ir

۴- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، r.sajjad@modares.ac.ir

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۲/۲۳، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۴۰۱/۰۵/۱۲، پذیرش: ۱۴۰۱/۰۵/۱۶)

چکیده: در این مقاله مشعل طبقه‌ای کمبریج-سندیا به منظور بررسی اثرات نفوذ مولکولی در احتراق طبقه‌ای و پیش-آمیخته، با افزودن دو مقدار مختلف هیدروژن به سوخت شبیه‌سازی شده است. برای این منظور دو مدل متفاوت در نظر گرفته شده که در مدل اول از فرض عدد اشمیت برابر یک برای تمام گونه‌ها و در مدل دوم از اعداد اشمیت متفاوت برای هر گونه‌ی شیمیایی استفاده شده است. نتایج حاصل نشان می‌دهند که با افزودن هیدروژن در حالت طبقه‌ای، نفوذ ترجیحی گونه‌های سبک‌تر بر کسر جرمی هیدروژن به ویژه در نزدیکی سطح جسم پهن تأثیر می‌گذارد و باعث افزایش ۴ برابری مقدار محاسبه شده برای کسر جرمی این گونه می‌شود. بنابراین نمی‌توان اثرات نفوذ مولکولی را در معادلات حاکم نادیده گرفت. در حالت پیش‌آمیخته هر چند نفوذ مولکولی تأثیر کمی بر غلظت گونه‌ها دارد ولی همچنان بر توزیع دما موثر است. به طوری که با افزودن ۴۰ درصد هیدروژن، دمای بیشینه افزایش ۲ و ۵ درصدی و میانگین دما افزایش ۱۲ و ۱۵ درصدی را به ترتیب در حالت‌های پیش‌آمیخته و طبقه‌ای نشان می‌دهند. به‌طور کلی، افزایش مقدار هیدروژن، ساختار شعله را به‌طور قابل توجه‌تری تغییر می‌دهد، به‌ویژه در مورد ناحیه باز چرخشی در بالای جسم پهن، که با افزودن هیدروژن کوتاه‌تر می‌شود.

کلیدواژگان: نفوذ مولکولی، عدد اشمیت، مشعل چرخشی طبقه‌ای، احتراق آشفته، غنی‌سازی با هیدروژن

مقدمه

در حال حاضر، سوخت‌های فسیلی ۸۰ درصد انرژی مورد نیاز جهان را تأمین می‌کنند، اما آلاینده‌هایی که از آن‌ها منتشر می‌شوند، برای سلامتی و محیط زیست خطرناک‌اند. از این رو روش‌های احتراقی متعددی با فناوری بالا و پاک توسعه یافته‌اند، از جمله احتراق پیش‌آمیخته رقیق، احتراق طبقه‌ای و احتراق غنی شده با هیدروژن. از آنجایی که احتراق پیش‌آمیخته رقیق احتراق کامل را تضمین می‌کند، مونوکسید کربن کاهش می‌یابد و به‌دلیل دمای پایین حاصل از احتراق آلاینده ناکس (NO_x) و سایر آلاینده‌های حساس به دماهای بالا فقط در حد کمی تولید می‌شوند، اما این رژیم احتراقی به دلیل عملکرد در نزدیکی حد شعله‌وری پایین، در معرض ناپایداری‌هایی نظیر برخاستگی، وزش و خاموشی شعله قرار دارد. برای افزایش پایداری تحت این شرایط می‌توان از روش‌های متعددی مانند استفاده از نواحی باز چرخشی، احتراق طبقه‌ای و غنی‌سازی سوخت با هیدروژن استفاده کرد. ایجاد نواحی باز چرخشی با استفاده از جسم پهن و جریان‌های چرخشی یک روش رایج در بسیاری از تجهیزات احتراقی است [۲، ۱]. در مورد رژیم احتراقی طبقه‌ای، که در آن مخلوط‌های ورودی طبقات مختلف با اعداد هم‌ارزی مختلف وارد ناحیه‌ی احتراقی می‌شوند و گرادیان عدد هم‌ارزی در حداقل یک جهت مختصاتی وجود دارد، نشان داده شده است که بسیاری از پارامترهای میدان تحت تأثیر طبقه‌بندی قرار می‌گیرند، مانند آزادسازی حرارت، سرعت شعله، ساختار موضعی شعله، بازده احتراق، و انتشار آلاینده‌ها [۳]. برای مثال سرعت شعله آرام با طبقه‌بندی افزایش می‌یابد [۴]. علاوه بر این، یک مخلوط طبقه‌بندی شده با نسبت هم‌ارزی کلی یکسان با حالت مخلوط کاملاً همگن (پیش‌آمیخته)، سرعت شعله آشفته بالاتری را در

رژیم احتراقی رقیق نشان می‌دهد [۵]. همچنین طبقه‌بندی نرخ متوسط واکنش‌ها را در شعله‌های رقیق افزایش می‌دهد [۶] که دلیل آن‌ها مرتبط با حالت پشتیبانی از پشت^۱ در این شعله‌ها است. مخلوط داخلی غنی‌تر با ایجاد دمای بالاتر و غلظت بیشتر رادیکال‌های فعال باعث افزایش واکنش‌پذیری شعله‌های طبقه‌ای در مقایسه با شعله‌های پیش‌آمیخته می‌شود. همچنین تعداد زیادی از تجهیزات احتراقی مانند توربین‌های گازی، موتورهای هوایی و موتورهای خودرو، در حالت پیش‌آمیخته ناهمگن یا طبقه‌ای موضعی عمل می‌کنند، که دلیل آن یا برای پایداری شعله در احتراق فوق رقیق، یا برای برآورده کردن محدودیت‌های موجود در مورد طول ناحیه اختلاطی است [۳] که نشان از کاربردی بودن این رژیم احتراقی دارد.

در مورد غنی‌سازی سوخت با هیدروژن، نشان داده شده است که افزودن هیدروژن به سوخت‌های هیدروکربنی پایداری شعله را، به‌ویژه در شرایط بسیار رقیق، بهبود می‌بخشد [۷-۹]، زیرا با افزودن هیدروژن، واکنش‌پذیری شعله به دلیل افزایش غلظت رادیکال‌های فعال (O, H و OH) افزایش می‌یابد [۱۰، ۱۱]. همچنین انتشار منوکسید کربن و هیدروکربن‌های نسوخته با افزودن هیدروژن کاهش می‌یابد [۱۲]، در عین حال انتشار آلاینده ناکس به دلیل دمای بالاتر افزایش می‌یابد، البته این عیب را می‌توان با سوزاندن مخلوط‌های فوق رقیق جبران کرد، زیرا هیدروژن حد شعله‌وری پایین را گسترده‌تر می‌کند [۱۳].

هاکس و چن [۸]، با استفاده از شبیه‌سازی عددی مستقیم (DNS)، اثر غنی‌سازی هیدروژن را بر روی شعله‌ی متان/هوای پیش‌آمیخته رقیق بررسی کردند و به این نتیجه رسیدند که غنی‌سازی سوخت هیدروکربنی با هیدروژن منجر به دستیابی به حد شعله‌وری پایین‌تر و افزایش مقاومت در برابر کرنش می‌شود. همچنین مطالعات قبلی نشان داده‌اند [۱۴] که با افزایش مقدار هیدروژن، جبهه شعله کوتاه‌تر می‌شود، که علت آن افزایش سرعت سوزش ضمن ثابت ماندن سرعت متوسط جریان است.

در مورد چالش‌های شبیه‌سازی عددی شعله‌های غنی‌شده با هیدروژن، می‌توان گفت که به دلیل ناپایداری حرارتی-نفوذی، افزودن هیدروژن به یک سیستم پیچیدگی مدل‌سازی را افزایش می‌دهد، از این رو مدل‌های عددی دقیق‌تری مورد نیاز است تا اثرات پدیده‌هایی نظیر نفوذ مولکولی بر پارامترهای جریان و شعله مورد مطالعه قرار گیرد و نتایج حاصل از دقت بالاتری برخوردار شوند. نفوذ ترجیحی، در حضور گونه‌ی فعال و پویای هیدروژن در جریان سوخت و با توجه به اثرات آرام‌سازی مجدد جریان تحت اثر احتراق، غیرقابل چشم‌پوشی است و تأثیرات مهمی مانند افزایش چروکیدگی شعله، افزایش سطح شعله و به تبع آن افزایش ورود هوا به ناحیه‌ی احتراقی را در پی دارد [۱۵]. آزمایش‌های متعددی برای بررسی تأثیر افزودن هیدروژن بر پایداری، واکنش‌پذیری و انتشار آلاینده‌های شعله‌های متان-هوا انجام شده است [۸، ۱۰، ۱۶]. بهمنی [۱۷] و همکاران با شبیه‌سازی یک بعدی شعله‌های متان هوای غنی‌شده با هیدروژن به بررسی اثر افزودن درصدهای مختلف هیدروژن بر بازه‌ی پایداری شعله پرداختند و نشان دادند که افزودن ۱۰ درصد هیدروژن به سوخت متان باعث گسترش حدود شعله‌وری می‌شود، اما افزودن مقدار هیدروژن بیشتر تأثیری بر حد شعله‌وری پایین نداشته و تنها حد شعله‌وری بالا را گسترش می‌دهد. چیتگرها [۱۸] و همکاران با استفاده از مدل‌های فلیملت پادیا و ناپایا و با فرض عدد لوئیس برابر یک برای گونه‌ها، به بررسی شعله‌ی نفوذی متان/هیدروژن پرداختند. آن‌ها برای افزایش دقت محاسبات پیشنهاد کردند تا نفوذ مولکولی با استفاده از اعداد لوئیس غیر یک در محاسبات لحاظ شود. تابع جماعت [۱۹] و همکاران به بررسی خصوصیات احتراقی شعله‌ی نفوذی متان/هیدروژن در مشعل چرخشی با مانع پرداختند و نشان دادند که افزودن هیدروژن باعث کاهش طول شعله می‌شود و این کاهش با شدت چرخش رابطه معکوس دارد، در شدت چرخش کم، بیشترین کاهش در طول شعله مشاهده شد. افزودن ۲۰ درصد هیدروژن به متان در سری شعله‌های دارمشتات^۲ نفوذ مولکولی متفاوتی برای گونه هیدروژن را نشان داده است [۲۰]. بر اساس این نتایج، ون و همکاران [۲۱] از رویکرد فلیملت^۳ برای تجزیه و تحلیل ساختار شعله با در نظر گرفتن انتشار مولکولی و اثرات کرنش استفاده کردند. نتایج نشان داد که با افزایش اختلاط آشفته، نفوذ مولکولی کم اهمیت‌تر می‌شود و فرض عدد لوئیس برابر یک، به خوبی مدل‌های میانگین مخلوط و چند جزئی در این موقعیت‌ها عمل می‌کند [۲۱]. مردانی و

¹ Back supported

² Darmstadt

³ flamelet

همکاران [۲۲] نفوذ مولکولی را با اختلاط آشفته با استفاده از مدل‌های نفوذ دوگانه و چند جزئی مقایسه کردند و ثابت کردند که نفوذ مولکولی در احتراق بدون شعله بسیار مهم است. صلواتی زاده و همکاران [۲۳]، تأثیر نفوذ مولکولی و تغییرات در مقادیر اعداد اشمیت گونه‌های مختلف را بر دقت مدل در رژیم احتراقی بدون شعله بررسی کردند. مطابق یافته‌های آن‌ها، اگر از اعداد اشمیت مناسب برای هر گونه استفاده نشود، نفوذ مولکولی بر نتایج تأثیر نمی‌گذارد. آن‌ها عنوان کردند که در رژیم احتراقی بدون شعله، دما و کسر جرمی گونه هیدروکسیل را می‌توان با افزودن نفوذ مولکولی، بهتر پیش‌بینی کرد، اما اثرات نفوذ مولکولی در رژیم‌های احتراق معمولی ناپدید می‌شود. به‌طور کلی برخلاف جریان آشفته‌ی غیرواکنشی، که در آن اختلاط آشفته غالب است، در جریان آشفته‌ی واکنشی، اختلاط آشفته و نفوذ مولکولی می‌توانند قابل مقایسه باشند. بنابراین هیچ کدام را نمی‌توان نادیده گرفت زیرا گرمای آزاد شده توسط احتراق (برهمکنش احتراق و آشفته‌گی) باعث انبساط میدان جریان می‌شود و ورتیسیتیته را کاهش می‌دهد [۲۴]، که دلیل آن افزایش ویسکوزیته [۱۵] و افت چگالی در امتداد جبهه شعله است، که می‌تواند شش تا هفت برابر کاهش یابد [۲۵].

در زمینه‌ی اثرات نفوذ ترجیحی در مشعل طبقه‌ای کمبریج-سندیا، اینانج [۲۶] و همکاران نشان دادند که در نزدیکی ورودی سرمشعل و ناحیه‌ی بازچرخشی روی جسم پهن، اثرات نفوذ مولکولی قابل توجه است همچنین مطالعات پیشین [۲۷]، [۲۸] نشان دادند که وجود ناحیه بازچرخشی روی جسم پهن اثرات نفوذ ترجیحی را تقویت می‌کند، نفوذ ترجیحی باعث افزایش عدد هم‌ارزی موضعی می‌شود که به دلیل نفوذ ترجیحی گونه‌های پویا مثل هیدروژن به سمت پیشانی شعله و همچنین به دام افتادن گونه‌های سنگین مثل دی اکسید کربن در ناحیه بازچرخشی روی جسم پهن است. در حقیقت، به دلیل وجود این گرادیان موضعی عدد هم‌ارزی و گرادیان عدد هم‌ارزی در حالت طبقه‌ای، اثرات نفوذ ترجیحی قابل توجه است.

هدف این تحقیق این است که چگونگی اثر گذاری نفوذ مولکولی بر ساختار شعله‌های طبقه‌ای غنی شده با هیدروژن را مورد مطالعه قرار دهد، همچنین مشخص کند که آیا افزودن ترم نفوذ مولکولی به معادلات حاکم، بر میدان جریان، دما و کسر جرمی گونه‌ها تأثیر می‌گذارد یا اثر محسوسی ندارد. همچنین به بررسی اثر افزودن دو مقدار مختلف هیدروژن بر میدان جریان و غلظت گونه‌های مهم پرداخته شده است تا تأثیر غنی‌سازی بر ناحیه واکنشی و پایدارسازی شعله بررسی شود. در حال حاضر، تنها تعداد معدودی از مقالات اثر نفوذ مولکولی در مشعل‌های طبقه‌ای را بررسی کرده‌اند. و تأثیر در نظر گرفتن اعداد مختلف اشمیت در مقابل عدد اشمیت برابر یک برای هر گونه در مشعل طبقه‌بندی شده کمبریج-سندیا با غنی‌سازی سوخت با هیدروژن در نظر گرفته نشده است. در این مطالعه نرم‌افزار متن باز این‌فوم^۱ برای بررسی شعله هیدروژن/متان/هوا طبقه‌ای استفاده شده است. در ابتدا اعتبارسنجی مدل‌ها با استفاده از احتراق متان/هوا انجام می‌شود و سپس هیدروژن به جریان سوخت اضافه می‌شود و در نهایت اثرات دو مدل مختلف بر ساختار شعله، دما و کسر جرمی گونه‌ها بررسی می‌شود.

هندسه‌ی سرمشعل

شکل ۱، هندسه‌ی مشعل را به‌صورت شماتیک نشان می‌دهد. در این سرمشعل می‌توان نسبت هم‌ارزی هر طبقه را به‌طور مستقل از طبقه دیگر تنظیم کرد تا شعله‌هایی با نسبت‌های طبقه‌بندی متفاوت ایجاد شود. تنها دو مورد نشان داده شده در جدول ۱ در این مطالعه بررسی خواهند شد. در حالت اول عدد هم‌ارزی هر دو طبقه یکسان است و رژیم احتراقی پیش‌آمیخته است (SwB2)، در حالی که در حالت دوم عدد هم‌ارزی طبقات متفاوت است و سرمشعل در رژیم احتراقی طبقه‌ای کار می‌کند (SwB6). سرعت طبقه‌ی بیرونی، داخلی و جریان هوای ثانویه، که در پیرامون سرمشعل تعبیه شده تا از ورود هوای اطراف جلوگیری شود، در هر دو حالت شبیه‌سازی شده ثابت و به ترتیب برابر با $۸/۳۱$ ، $۱۸/۷$ و $۰/۴$ متر بر ثانیه می‌باشند. با افزودن هیدروژن سرعت مخلوط‌های پیش‌آمیخته وارد شده از طبقات و نسبت هم‌ارزی کلی ثابت نگه‌داشته می‌شود. بنابراین با اضافه شدن هیدروژن چگالی، و دبی جرمی سوخت کاهش می‌یابد.

^۱ OpenFOAM

جدول ۱- شرایط کاری سر مشعل در دو حالت مختلف

Table 1- Selected operating conditions

Flame	S	ϕ_i	ϕ_o	SR
SwB2	0.45	0.75	0.75	1
SwB6	0.45	1	0.5	2

روش عددی

در این مطالعه، معادلات میانگین‌گیری شده به روش فاور شامل معادلات پیوستگی، تکانه، انرژی و گونه‌ها به‌عنوان معادلات جریان استفاده می‌شوند. شبیه‌سازی‌ها با استفاده از کد متن باز دینامیک سیالات محاسباتی (CFD^۱) و با استفاده از نرم‌افزار اپن‌فوم انجام شده‌اند. از روش متوسط‌گیری رینولدز (RANS^۲) برای حل معادلات میانگین‌گیری شده نویر استوکس^۳ استفاده شده است. ویسکوزیته آشفته در معادلات تکانه با استفاده از روش دو معادله‌ای $k - \omega$ SST^۴ بر اساس فرضیه بوزینسک^۵ محاسبه شده‌اند. به‌منظور بهبود دقت محاسبات از توابع دیواره‌ای مناسب نیز استفاده شده است. در این مطالعه از سینتیک شیمیایی کاهش یافته‌ی والورانی^۶ [۲۹] که شامل ۱۵ گونه و ۵۷ واکنش است برای شبیه‌سازی ساختار شعله، دما و کسر جرمی گونه‌ها استفاده شده است.

مطابق مطالعات قبلی [۳۰]، انتقال حرارت تشعشعی در طول شبیه‌سازی‌ها نادیده گرفته شده است. به‌منظور بررسی اثرات نفوذ مولکولی از روش اعداد اشمیت ثابت برای گونه‌ها استفاده شده است. به‌طور کلی، از روش‌هایی که ضمن در نظر گرفتن اثرات نفوذ مولکولی، زمان محاسبات زیادی را تحمیل نمی‌کنند، استفاده از اعداد لوئیس و اشمیت مختلف برای گونه‌ها است. برای محاسبه اعداد لوئیس مناسب هر گونه، تابع جماعت [۳۱] و همکاران از کد کم وان دی^۷ استفاده کردند. همچنین مظاهری [۳۲] و همکاران از کد پری‌میکس^۸ نرم‌افزار کمکین^۹ برای محاسبه اعداد اشمیت مناسب گونه‌ها استفاده کردند. مطابق یافته‌های گیاکومزی [۳۳] و همکاران، استفاده از روش اعداد اشمیت ثابت برای گونه‌ها بهتر از فرض عدد لوئیس ثابت است؛ زیرا برای شعله‌های پیش‌آمیخته و غیرپیش‌آمیخته تغییر عدد اشمیت هر گونه نسبت به دما کمتر از تغییرات عدد لوئیس است. علت آن کمتر بودن وابستگی عدد اشمیت به دما در مقایسه با عدد لوئیس است. می‌توان گفت عدد اشمیت به‌طور عمده به ترکیب شیمیایی وابسته است. براساس این یافته‌ها، دو شعله‌ی غیرپیش‌آمیخته (متان خالص و متان-هیدروژن با ۴۰ درصد حجمی هیدروژن در جریان سوخت) و یک شعله‌ی پیش‌آمیخته جزئی با اعداد هم‌ارزی مطابق حالت طبقه‌ای مشعل کمبریج-سندیا در هندسه‌ی شعله‌ی جریان متقابل با استفاده از نرم‌افزار کانتر، به‌صورت یک‌بعدی، شبیه‌سازی شدند و اعداد اشمیت به‌دست آمده با یکدیگر مقایسه شدند. با توجه به اختلاف کم مقادیر حاصل از شبیه‌سازی‌های یک‌بعدی و مرجع [۲۳]، از مقادیر گزارش شده در این مرجع برای بیشتر گونه‌ها استفاده شد و برای گونه‌های دارای اختلاف اشمیت بالا، میانگین اعداد اشمیت به دست آمده از شبیه‌سازی سه شعله‌ی مختلف یک‌بعدی استفاده شد. بر این اساس، یک ترم نفوذ مولکولی با استفاده از کد اپن‌فوم به معادله انتقال گونه‌ها اضافه شده است که امکان استفاده از اعداد اشمیت متفاوت و ثابت برای هر گونه را، مطابق معادله‌ی (۱) فراهم می‌کند. در مدل اول، تمامی اعداد اشمیت برابر یک در نظر گرفته شده‌اند و گونه‌های سبک هیچ تفاوتی با گونه‌های سنگین ندارند و عملاً نفوذ مولکولی تأثیر محسوسی در معادلات ندارد. در حالی که در مدل دوم اعداد اشمیت برای گونه‌های مختلف متفاوت هستند و اثرات نفوذ مولکولی به این ترتیب وارد حل شده است. همچنین در مدل اول ضرایب ثابت معادله ساترلند هم برای همه‌ی گونه‌ها یکسان هستند در حالی که در مدل دوم این ضرایب ثابت برای هر گونه مقدار مخصوص به آن گونه را دارد.

^۱ Computational Fluid Dynamics

^۲ Reynolds Averaged Navier Stokes

^۳ Navier-Stokes

^۴ Shear Stress Transport

^۵ Boussinesq's assumption

^۶ Valorani

^۷ chem1D

^۸ Premix

^۹ Chemkin

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Y}_s) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{Y}_s\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma_s \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial x_j}\right) + \tilde{\omega}_s \quad s = 1, \dots, n \quad (1)$$

$$\Gamma_s = \frac{\mu}{Sc_s} + \frac{\mu_t}{Sc^t} \quad (2)$$

در معادله (۲)، μ و μ_t به ترتیب گرانیوی دینامیکی آرام و اغتشاشی هستند، در حالی که Sc_s و Sc^t به ترتیب اعداد اشمیت گونه s و عدد اشمیت آشفته را نشان می‌دهند. در محاسبه‌ی μ ، ضرایب ثابت معادله ساترلند از مرجع [۲۳] گرفته شده‌اند، مقادیر Sc_s مطابق جدول ۲ هستند و Sc^t در تمام شبیه‌سازی‌ها برابر با ۰/۷ در نظر گرفته شده است.

معادلات حاکم با استفاده از رویکرد حجم محدود گسسته‌سازی شده‌اند. اسکیم‌های TVD^۱ مرتبه دو برای گسسته‌سازی ترم‌های جابه‌جایی برای اطمینان از پایداری و دقت استفاده شده‌اند همچنین از الگوریتم پیزو^۲ برای برطرف کردن کولپینگ میان سرعت و فشار استفاده شده است. مشابه کارهای قبلی [۳۴-۳۶]، دو معیار برای اطمینان از همگرایی حل استفاده شده است. در معیار اول، باقیمانده همه متغیرها در هر گام زمانی باید کمتر از 10^{-6} باشد. در معیار دوم باید اطمینان حاصل شود که دمای متوسط کمتر از ۱ کلوین و حداکثر سرعت کمتر از ۰/۱ متر بر ثانیه در یک مقطع نزدیک خروجی تغییر کند. (۱۰ درصد باقی مانده تا صفحه‌ی خروجی). دامنه محاسباتی سه بعدی (نشان داده شده در شکل ۱) یک ناحیه استوانه‌ای به قطر ۲۰۰ میلی‌متر و طول ۳۰۰ میلی‌متر است.

جدول ۲- ضرایب معادله ساترلند و اعداد اشمیت استفاده شده برای گونه‌های مختلف [۲۳]

Table 2- Sutherland coefficients and Schmidt numbers utilized for different species [23]

گونه	A_s	T_s	Sc	گونه	A_s	T_s	Sc
CH ₄	1.03 e-6	178.78	0.691	N ₂	1.5 e-6	135.27	0.764
H ₂	7.04 e-7	108.3	0.2	OH	1.512 e-6	273.93	0.53
H	6.64 e-7	117.01	0.15	CH ₃ O	1.512 e-6	120	0.953
O	2.18 e-6	166.69	0.5	HO ₂	1.512 e-6	120	0.763
O ₂	1.8 e-6	151.03	0.84	CH ₃	1.512 e-6	120	0.698
CO ₂	1.49 e-6	218.83	0.975	CO	1.53 e-6	146.32	0.86
HCO	1.512 e-6	120	0.93	H ₂ O	2.46 e-6	916.58	0.65
CH ₂ O	1.512 e-6	120	0.937				

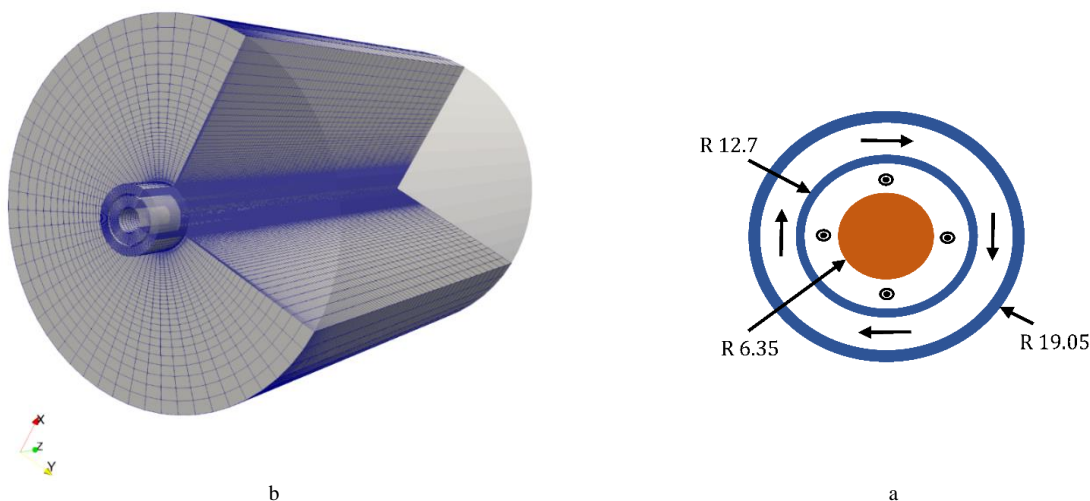


Figure 1. a- The top view of the stratified swirl burner (SwB) [28]. b- Computational domain. All dimensions are in mm

شکل a-۱ - نمای بالایی مشعل چرخشی طبقه‌ای (SwB) [۲۸]. b- شبکه محاسباتی. تمام ابعاد بر حسب میلی‌متر هستند.

¹ Total variation diminishing

² PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators)

جهت بررسی استقلال نتایج از شبکه محاسباتی حالت پیش‌آمیخته با استفاده از سه شبکه مختلف و حلگر پایه‌ی نرم‌افزار این‌فوم برای جریان‌های واکنشی^۱ شبیه‌سازی شده است. شبکه با ۱۶۰۰۰۰ سلول، مش پایه را تشکیل می‌دهد. مطابق شکل ۲، انحراف قابل توجهی در نتایج حاصل با ۴۷۰۰۰۰ سلول و ۸۰۰۰۰۰ سلول وجود ندارد.

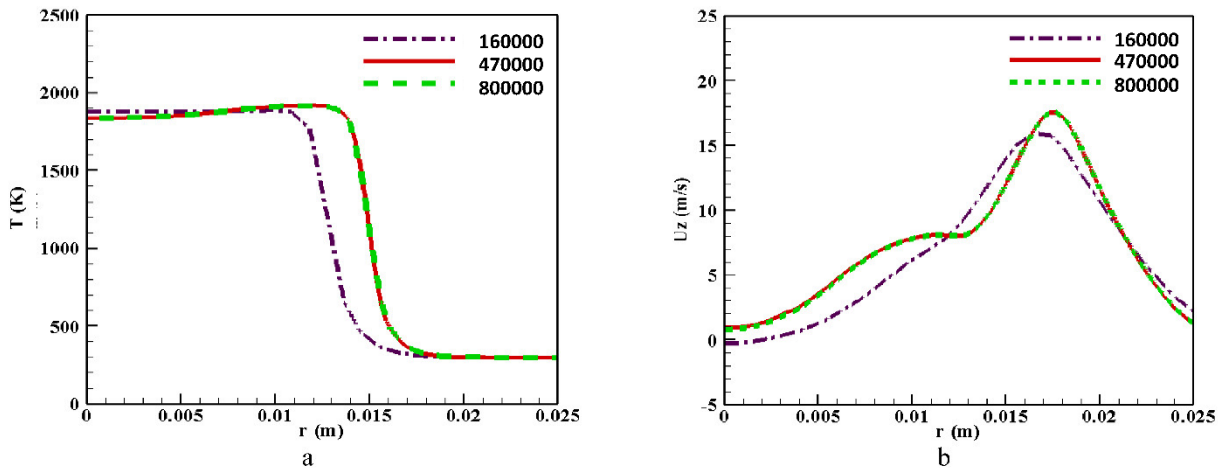


Figure 2- Grid independence check. Temperature profile (a) at section ($z=40$ mm) and axial velocity profile (b) at section ($z=30$ mm) with three different grid resolutions (The first grid has 160,000 cells, the second grid has 470,000 cells, and the third grid has 800,000 cells).

شکل ۲- بررسی استقلال حل از شبکه محاسباتی. پروفیل دمایی (a) در مقطع ۴۰ میلی‌متر و پروفیل سرعت محوری (b) در مقطع ۳۰ میلی‌متر با استفاده از سه شبکه‌بندی با تعداد سلول متفاوت (شبکه اول ۱۶۰۰۰۰ سلول، شبکه دوم ۴۷۰۰۰۰ سلول و شبکه سوم ۸۰۰۰۰۰ سلول).

در نتیجه، در این مطالعه از شبکه‌بندی متشکل از ۴۷۰۰۰۰ سلول برای کاهش هزینه‌های محاسباتی در طول شبیه‌سازی استفاده شده است. در ورودی هر دو طبقه، دما، مولفه‌های سرعت (مماسی U_{tan} و محوری U_z)، و ترکیبات مخلوط ورودی به عنوان شرط مرزی تعریف شده‌اند. شرط عدم لغزش و شرایط عایق در همه دیوارها اعمال شده است. برای میدان دور و صفحه خروجی، با توجه به این که به اندازه کافی از ناحیه واکنشی دور در نظر گرفته شده‌اند و با توجه به مطالعه قبلی [۳۷]، گرادیان صفر برای همه متغیرها اعمال می‌شود، به جز فشار که برابر با فشار اتمسفر است. شرایط مرزی اغتشاشی با توجه به طول مشخصه آشفتگی (در این مطالعه هفت صدم قطر هیدرولیکی) و شدت آشفتگی و مطابق رابطه (۳) و (۴) تعیین شده‌اند.

$$k = 1.5(|U|I)^2 \quad (3)$$

$$\omega = \frac{k^{0.5}}{C_{\mu}^{0.25} L} \quad (4)$$

در رابطه (۳)، $|U|$ اندازه سرعت و I شدت آشفتگی است. همچنین در رابطه (۴)، L نشان‌دهنده طول مشخصه آشفتگی و C_{μ} ثابت معادله و برابر با ۰/۰۹ است.

شرایط مرزی مورد استفاده در جدول ۳ نشان داده شده است.

جدول ۳- شرایط مرزی

Table 3- Boundary conditions

Flame	U_z (m/s)			U_{tan} (m/s)			ϕ		T(K)			I (%)			
	Inner slot	Outer slot	Co-axial air	Inner slot	Outer slot	Co-axial air	Inner slot	Outer slot	Inner slot	Outer slot	Co-axial air	Inner slot	Outer slot	Co-axial air	
SwB2	8.31	18.7	0.4	0	8.415	0	0.75	0.75	300			5			1
SwB6							1	0.5							

¹ reactingFoam

نتایج و بحث

مطالعات تجربی متعددی بر روی شعله‌های طبقه‌ای با استفاده از مشعل‌های مختلف ارائه شده است. این مطالعات، برای مثال، شامل مشعل چرخشی طبقه‌بندی شده کمبریج-سندبا است که داده‌های تجربی گسترده‌ای را در اختیار قرار می‌دهد [۲۸]. در این مشعل، مخلوط‌های پیش‌آمیخته با نسبت‌های هم ارزی مختلف از طریق دو ورودی حلقوی وارد سر مشعل می‌شوند (برای تولید نسبت‌های مختلف طبقه‌بندی $SR = \phi_i/\phi_o$). علاوه بر این، یک جریان ثانویه هوا نیز برای جلوگیری از ورود هوای اطراف وجود دارد. جریان چرخشی در طبقه بیرونی، با اعداد چرخش (Sw) متفاوت که نسبت بین سرعت مماسی و محوری است، به همراه جسم پهن مرکزی شعله را تثبیت می‌کنند و یک ناحیه بازچرخشی ایجاد می‌کنند. داده‌های این سرمشعل برای اعتبارسنجی نتایج حاصل از شبیه‌سازی این مطالعه مورد استفاده قرار گرفته‌اند. مقایسه‌ی نتایج حاصل از شبیه‌سازی عددی حاضر و اندازه‌گیری‌های تجربی موجود [۳۸، ۲۸] برای حالت طبقه‌ای، به منظور اعتبارسنجی مدل‌های مورد استفاده انجام شده است. در شکل ۳، مولفه‌های مماسی و محوری سرعت، دما و کسر جرمی دی‌اکسید کربن در مقاطع مختلف با نتایج تجربی برای هر دو مدل وجود دارد.

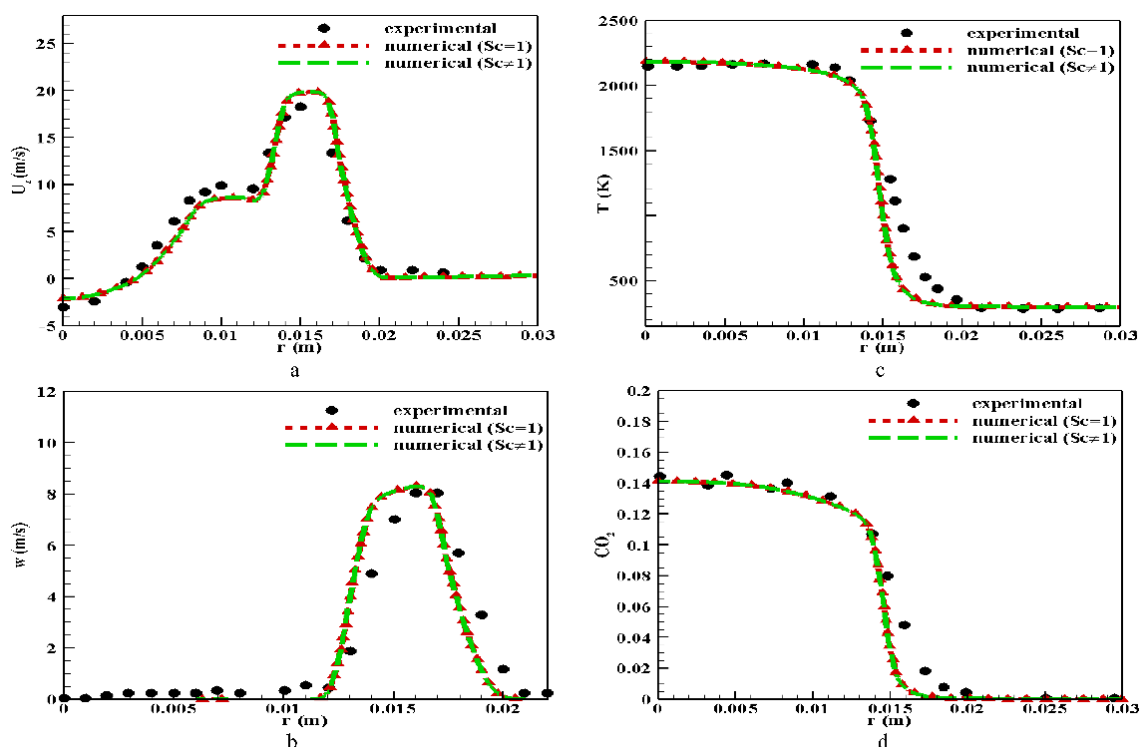


Figure 3- Comparison between experimental measurements [28, 38], and computations for SwB6. Profiles at YZ plane. (a) Axial velocity, (b) swirling velocity, (c) temperature, (d) CO_2 mass fraction. At cross sections: $z = 40$ mm (right column), $z = 10$ mm (left column)

شکل ۳- مقایسه بین نتایج تجربی [۲۸، ۳۸]، و نتایج شبیه‌سازی عددی برای حالت SwB6. پروفیل‌ها در صفحه YZ رسم شده‌اند. (a) سرعت محوری، (b) سرعت چرخشی، (c) دما، (d) کسر جرمی دی‌اکسید کربن. در مقاطع: ستون سمت راست ۴۰ میلی‌متر، ستون سمت چپ ۱۰ میلی‌متر.

نواحی حائز اهمیت برای نفوذ مولکولی

نسبت بین گرانیوی آشفته و مولکولی ($\frac{\mu_t}{\mu}$) در شکل ۴ با عنوان ($RTMV^1$) نشان داده شده است. نزدیک بودن این نسبت به عدد یک نشانگر نواحی‌ای است که نفوذ مولکولی و اختلاط آشفته از نظر اندازه قابل مقایسه هستند و نمی‌توان از اثرات نفوذ مولکولی صرف‌نظر کرد. با افزایش مقدار این نسبت اختلاط آشفته غالب‌تر خواهد بود و نفوذ ترجیحی تأثیر کمتری خواهد داشت. برعکس در نواحی که این نسبت کوچکتر از یک باشد، نفوذ مولکولی غالب‌تر خواهد بود. مطابق شکل ۴ ناحیه‌ای که نفوذ مولکولی و اختلاط آشفته هر دو حائز اهمیت هستند در حالت طبقه‌ای و بدون افزودن هیدروژن، بسیار بزرگتر از حالت پیش مخلوط است. ناحیه با $RTMV$ کمتر از ده، با افزودن هیدروژن و به ویژه در جهت شعاعی، افزایش می‌یابد. از این رو، هرچند اثر نفوذ مولکولی در حالت احتراق متان خالص ممکن است در پایین دست و نواحی دور از سرمشعل، تنها در حالت طبقه بندی شده مهم باشد، اما با افزودن هیدروژن اثرات نفوذ مولکولی در ناحیه وسیع‌تری، در پایین دست و در هر دو حالت طبقه‌ای و پیش‌آمیخته مهم خواهد بود. برای بررسی کمی این پارامتر، پروفیل‌های شعاعی $RTMV$ در مقاطع مختلف و روی خط مرکزی در شکل ۵ نشان داده شده‌اند. در شکل ۵ مشاهده می‌شود که نفوذ مولکولی در برخی مناطق نقش مهمی ایفا می‌کند. این نواحی در اثر اندرکنش‌های بین آشفته‌گی و احتراق و فرآیند آرام‌سازی مجدد جریان ایجاد می‌شوند. مطابق شکل ۵ با افزایش غلظت هیدروژن، نفوذ مولکولی در یک منطقه وسیع‌تر، هم به صورت شعاعی و هم به صورت محوری قابل توجه می‌شود.

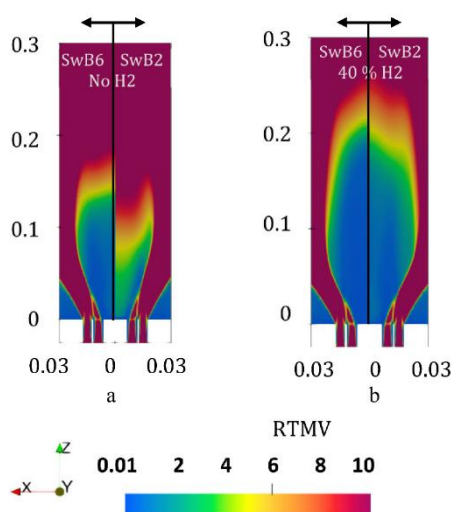


Figure 4- The contours of the ratio between turbulent and molecular viscosity ($RTMV$) for premixed (SwB2) and stratified (SwB6) cases. Pure methane as fuel (a) hydrogen enriched (40% on the volume of fuel basis) methane (b). The right half of each figure is related to the premixed case and the left half is related to the stratified case.

شکل ۴- کانتور $RTMV$ (نسبت بین ویسکوزیته آشفته و مولکولی) برای حالت: پیش‌آمیخته و طبقه‌ای. (a) متان خالص (b) متان غنی شده با هیدروژن (۴۰٪ حجمی). نیمه‌ی راست هر شکل مربوط به حالت پیش‌آمیخته و نیمه‌ی سمت چپ مربوط به حالت طبقه‌ای است.

چند مورد مهم در مورد موارد شبیه‌سازی شده که می‌توانند بر انتشار مولکولی تأثیر بگذارند قابل ذکر هستند. اولاً، $RTMV$ در حالت طبقه‌ای، همیشه کمتر از موارد پیش‌آمیخته است، به خصوص در احتراق متان خالص. بنابراین، انتظار می‌رود که نفوذ مولکولی تأثیر مهم‌تری در موارد طبقه‌ای داشته باشد. ثانیاً، یک مشخصه کلیدی جریان در مشعل‌های پایدار شده با جسم پهن و جریان چرخشی، وسعت و قدرت ناحیه بازچرخشی است. مطابق شکل ۶ در حالت طبقه‌بندی شده ناحیه بازچرخشی کوچکتری نسبت به حالت پیش‌آمیخته ایجاد می‌شود، همچنین با افزودن هیدروژن در هر دو حالت طبقه‌ای و

¹ Ratio of Turbulent to Molecular Viscosity ($RTMV$)

پیش‌آمیخته، کاهش وسعت نواحی بازچرخشی مشاهده می‌شود که این کاهش در حالت طبقه‌ای مشهودتر است. این ناحیه نقش مهمی دارد زیرا زمان ماند در آنجا طولانی‌تر است و نشان داده شده است که این منطقه می‌تواند اثرات نفوذ مولکولی را تقویت کند [۲۷].

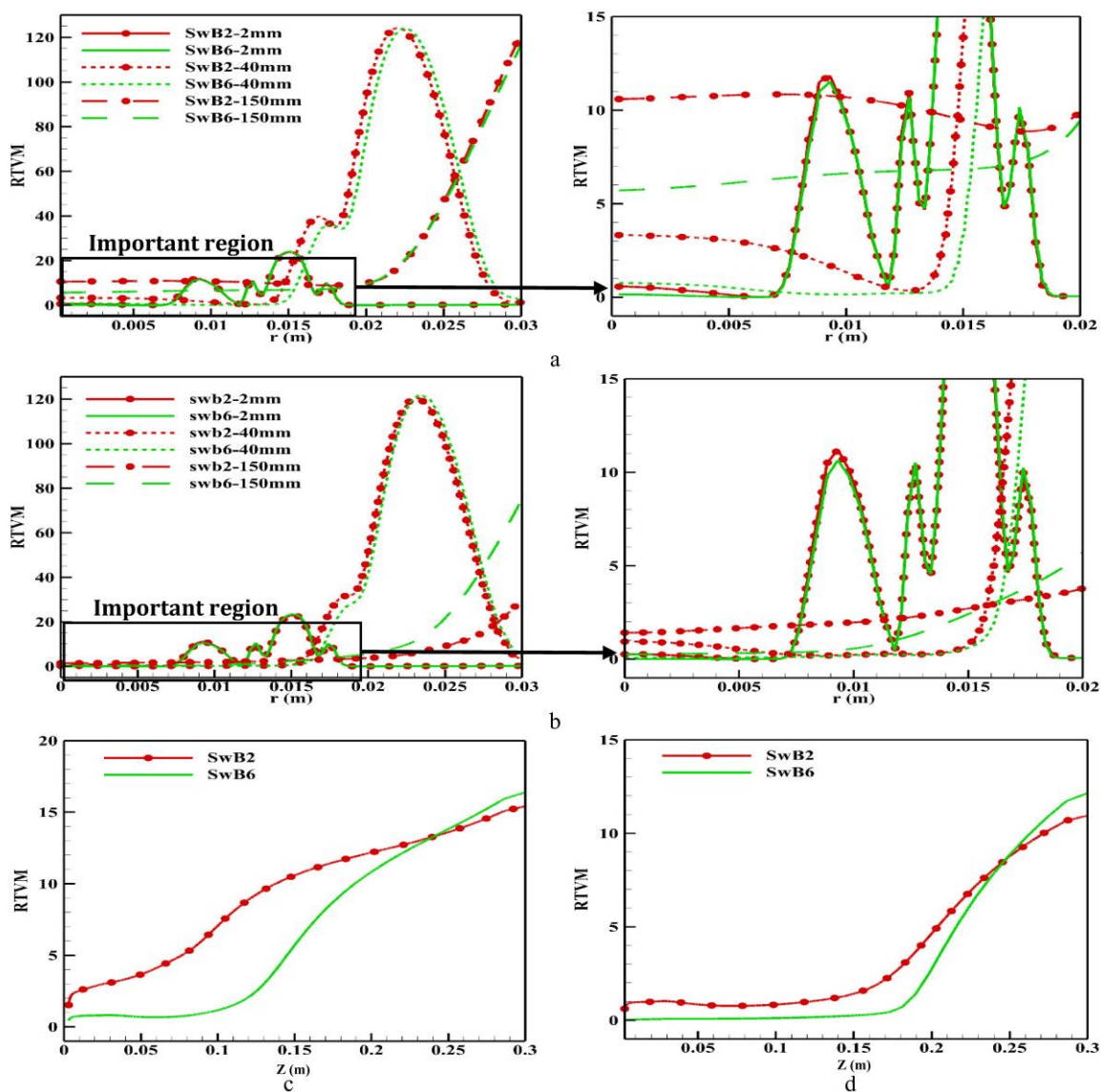


Figure 5- Radial profiles of RTVM at different cross-sections. Pure methane (a) hydrogen enriched methane (b) and axial profiles of RTVM. Pure methane (c) hydrogen enriched methane (d).

شکل ۵- پروفیل‌های شعاعی RTVM در مقاطع مختلف. متان خالص (a) متان غنی شده با ۴۰٪ هیدروژن (b) و پروفایل‌های محوری RTVM. متان خالص (c) متان غنی شده با ۴۰٪ هیدروژن (d).

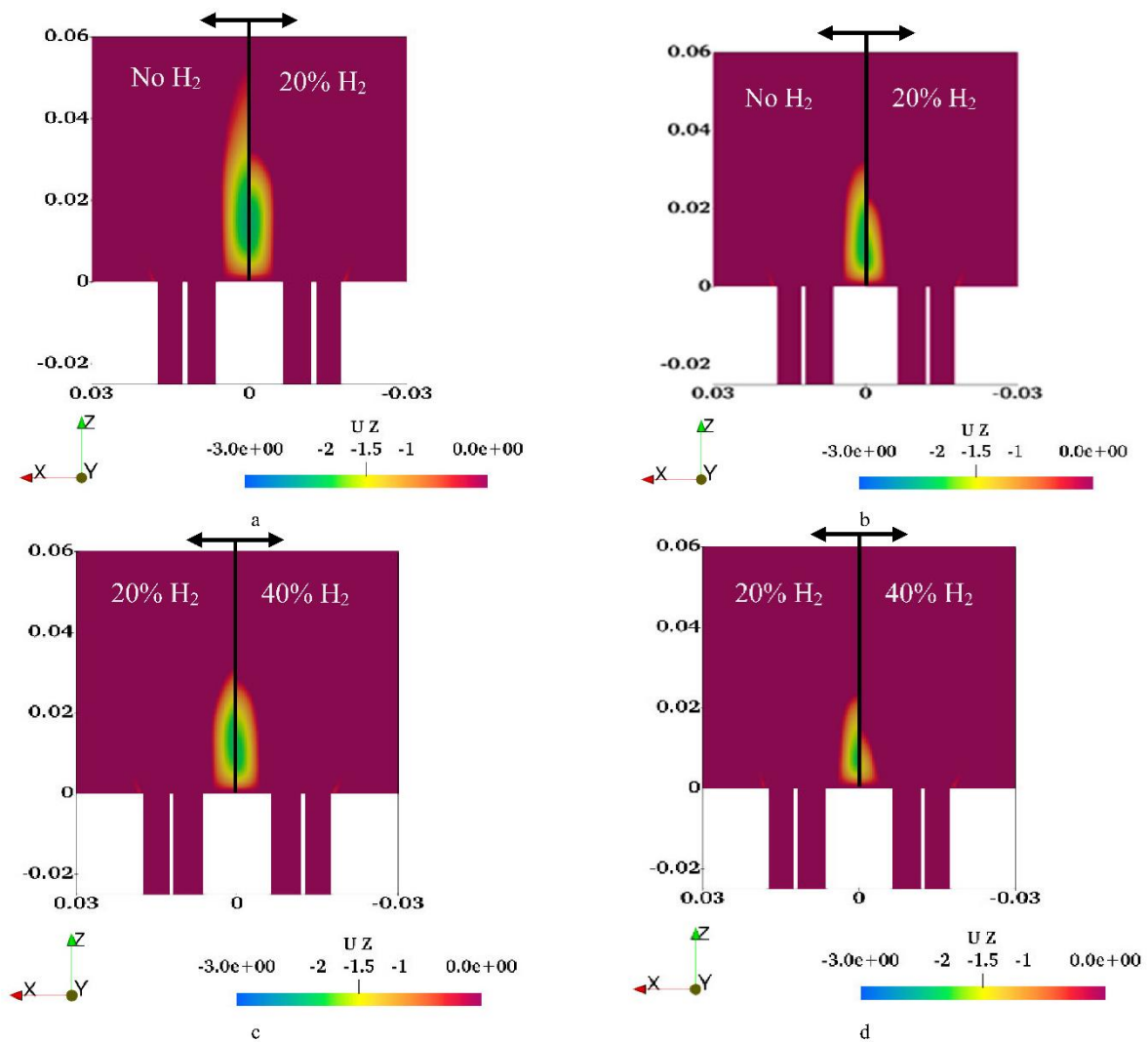


Figure 6- Changes in the recirculation zones by adding 20% and 40% of H_2 . Contours of axial velocity. The cut off is applied to values greater than zero to indicate the recirculation zone. For case: a, b- premixed, c, d- stratified.
 شکل ۶- تغییرات در ناحیه بازچرخشی با افزودن ۲۰ و ۴۰ درصد حجمی هیدروژن. کانطور سرعت محوری. مقادیر بیشتر از صفر برای نشان دادن منطقه بازچرخشی حذف شده اند. برای حالت: a و b- پیش آمیخته c و d- طبقه‌ای

از آنجایی که ناحیه بازچرخشی در حالت پیش‌آمیخته طولانی‌تر و قوی‌تر است، پیش‌بینی می‌شود که مولکول‌های سبک و پویا به دلیل انبساط حرارتی و زمان ماند طولانی‌تر از این ناحیه پخش شوند. ثالثاً، به دلیل طبقه داخلی غنی‌تر در موارد طبقه‌بندی شده، دمای بالاتری وجود دارد و مولکول‌ها انرژی جنبشی بیشتری دارند و این عامل باعث نفوذ بیشتر مولکول‌های پویا و سبک می‌شود. علاوه بر این، دمای بالاتر و آزادسازی حرارت باعث افزایش اثر آرام‌سازی مجدد جریان می‌شود و نفوذ مولکولی را مهم‌تر می‌کند. در نهایت، در حالت طبقه‌بندی شده، طبقه داخلی غنی‌تر است به طوری که هیدروژن بیشتری در دسترس است و باعث ایجاد گرادیان غلظت شدیدتری می‌شود که محرکی برای نفوذ مولکولی است. با در نظر گرفتن این نکات، نتایج شبیه‌سازی برای دما، و غلظت گونه‌های هیدروژن، هیدروکسیل، مونوکسید کربن و دی‌اکسید کربن در بخش‌های بعدی نشان داده شده‌اند.

شکل ۷، پروفیل‌های دمایی را در مقاطع مختلف نشان می‌دهد. بر اساس این شکل، مشاهده می‌شود که شبیه‌سازی‌ها زمانی که نفوذ مولکولی در نظر گرفته شده باشد و صرف‌نظر از حالت طبقه‌بندی شده یا پیش‌آمیخته، منجر به پیش‌بینی دمای

بالتری می‌شوند. نکته قابل توجه دیگر این است که هنگام در نظر گرفتن نفوذ مولکولی، شعله در مقاطع نزدیک خروجی مشعل به صورت شعاعی منبسط نمی‌شود، در حالی که در پایین دست (۱۵۰ میلی‌متر) انبساط شعله دیده می‌شود.

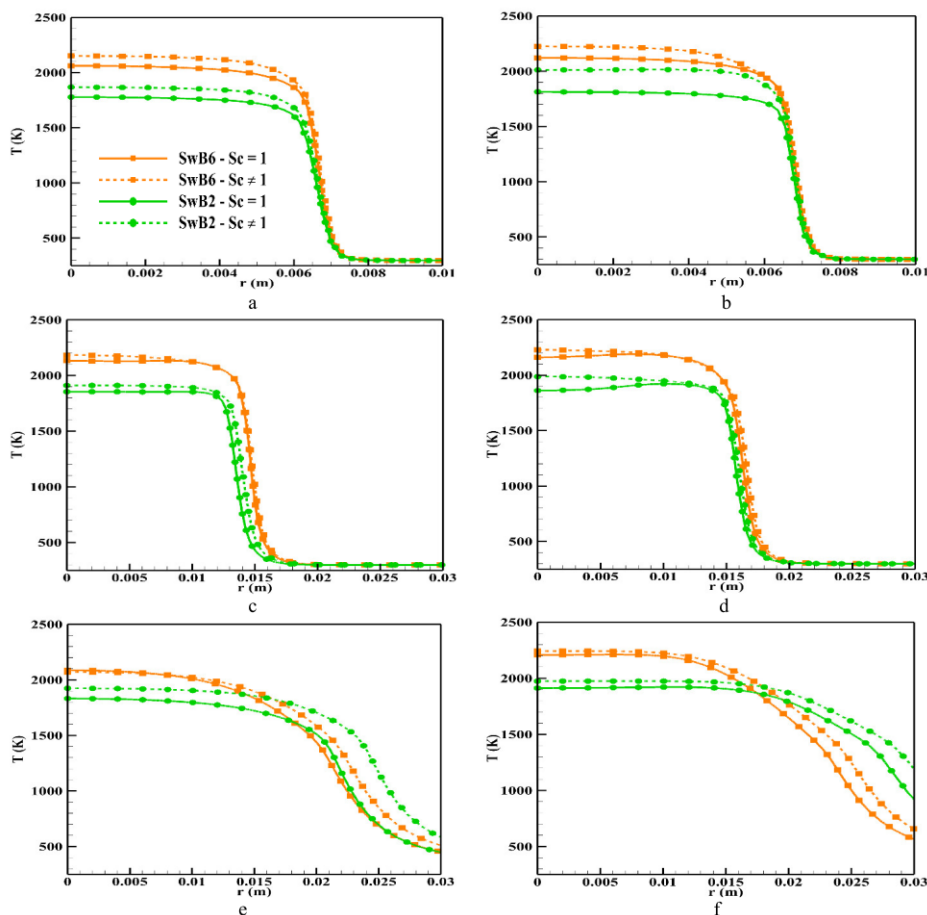


Figure 7- Temperature profiles at different cross sections. 2mm (top row) 40mm (middle row) 150mm (bottom row). Pure methane as fuel (left column) 40% hydrogen (on the volume of fuel basis) added to fuel stream (right column).

شکل ۷- پروفیل‌های دما در مقاطع مختلف. ۲ میلی‌متر (ردیف بالا) ۴۰ میلی‌متر (ردیف وسط) ۱۵۰ میلی‌متر (ردیف پایین). متان خالص به عنوان سوخت (ستون سمت چپ)، ۴۰ درصد هیدروژن (بر مبنای حجمی) به جریان سوخت (ستون سمت راست) اضافه شده است.

برای درک این که چگونه نفوذ مولکولی بر دما تأثیر می‌گذارد، پروفایل‌های شعاعی رادیکال هیدروکسیل، به عنوان مشخص‌کننده‌ی ناحیه واکنش و ناحیه دما بالا، و هیدروژن، به عنوان یک گونه بسیار پویا، به ترتیب در شکل ۸ و شکل ۹ نشان داده شده‌اند. شکل ۸ نشان می‌دهد که کسر جرمی هیدروکسیل در تمامی مقاطع در هر دو حالت طبقه‌ای و پیش‌آمیخته تحت شرایطی که از اعداد اشمیت متفاوت استفاده شده باشد بیشتر است. در مقایسه با ناحیه‌های پایین دست، افزایش کسر جرمی هیدروکسیل در نزدیکی خروجی مشعل بیشتر است (مقطع ۲ میلی‌متر). انبساط شعاعی پروفیل‌های کسر جرمی هیدروکسیل در ناحیه‌های پایین دست نشان دهنده گسترش مناطق واکنش در جهت شعاعی است.

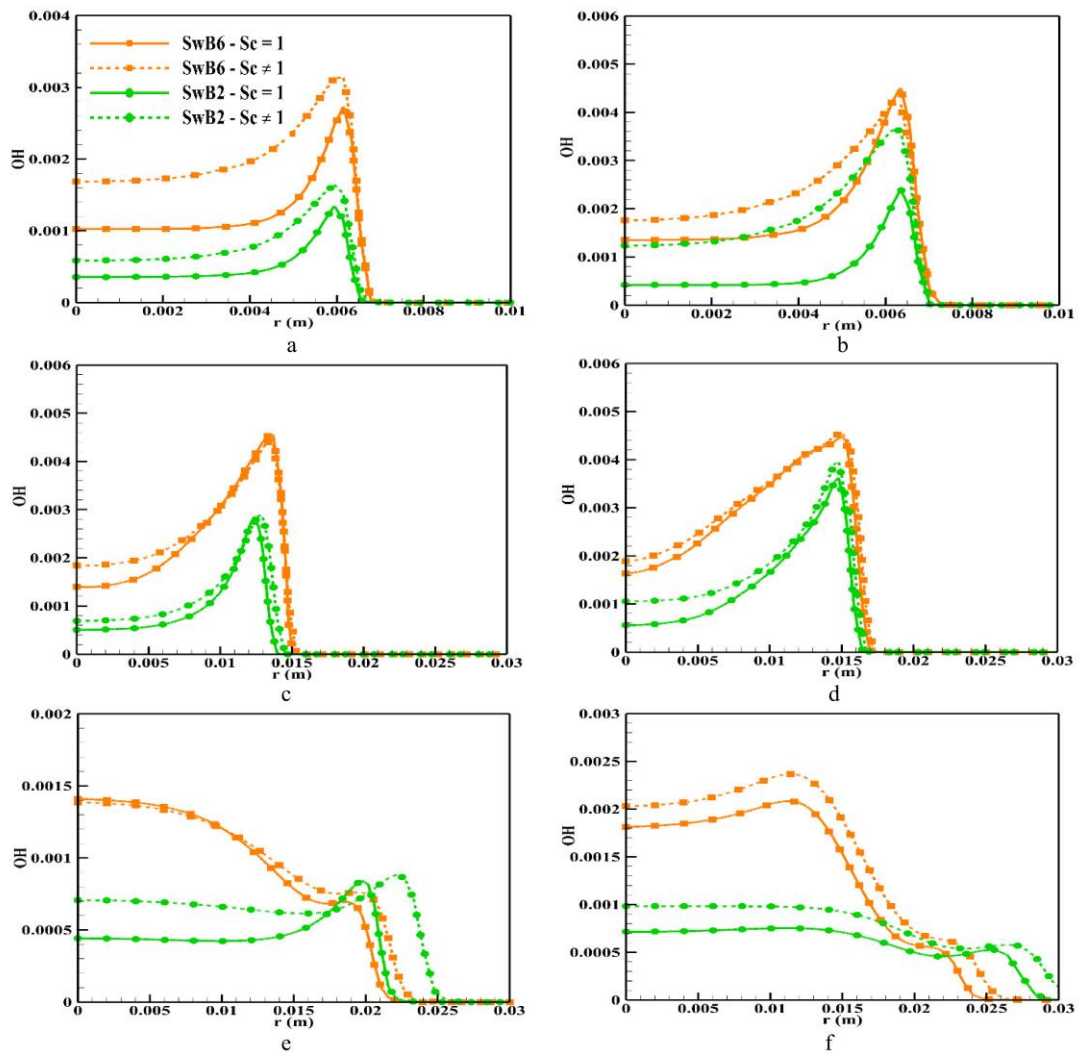


Figure 8- Comparison of OH mass fraction using two models for premixed and stratified case. 2mm (top row) 40mm (middle row) 150mm (bottom row). Pure methane as fuel (left column) 40% hydrogen (on the volume of fuel basis) added to fuel stream (right column).

شکل ۸- مقایسه کسر جرمی هیدروکسیل با استفاده از دو مدل برای حالت پیش آمیخته و طبقه‌بندی شده. ۲ میلی‌متر (ردیف بالا) ۴۰ میلی‌متر (ردیف وسط) ۱۵۰ میلی‌متر (ردیف پایین). متان خالص به عنوان سوخت (ستون سمت چپ)، ۴۰ درصد هیدروژن (بر مبنای حجمی) به جریان سوخت (ستون سمت راست) اضافه شده است.

شکل ۹ کسر جرمی هیدروژن را در مقاطع مختلف نشان می‌دهد. به دلیل سبکی و پویایی بالای مولکول‌های هیدروژن، نفوذ مولکولی بر کسر جرمی هیدروژن تأثیر می‌گذارد. در نظر گرفتن نفوذ مولکولی، در حالی که سوخت مورد استفاده متان خالص باشد منجر به پیش‌بینی مقدار کمتر هیدروژن در تمام مقاطع می‌شود. از آنجایی که در این حالت، هیدروژن فقط در ناحیه واکنش تولید می‌شود و به صورت شعاعی به سمت بیرون پخش می‌شود، بنابراین یک گسترش جزئی در توزیع شعاعی و کاهش در مقدار بیشینه وجود دارد.

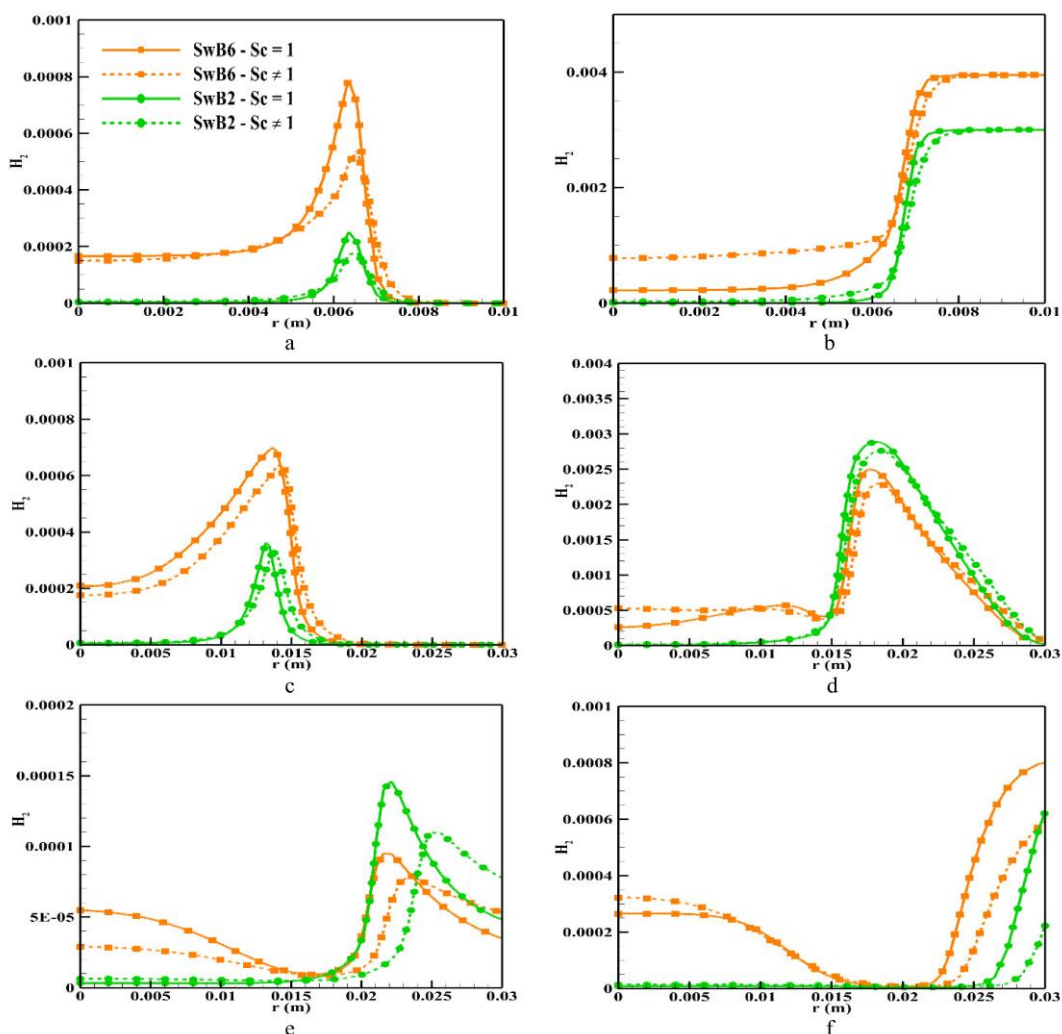


Figure 9- Comparison of H_2 mass fraction using two models for premixed and stratified case. 2mm (top row) 40mm (middle row) 150mm (bottom row). Pure methane as fuel (left column) 40% hydrogen (on the volume of fuel basis) added to fuel stream (right column)

شکل ۹- مقایسه کسر جرمی هیدروژن با استفاده از دو مدل برای حالت پیش مخلوط و طبقه‌بندی شده. ۲ میلی متر (ردیف بالا) ۴۰ میلی متر (ردیف وسط) ۱۵۰ میلی متر (ردیف پایین). متان خالص به عنوان سوخت (ستون سمت چپ) ۴۰ درصد هیدروژن (بر مبنای حجمی) به جریان سوخت (ستون سمت راست) اضافه شده است.

هنگام غنی‌سازی با هیدروژن، به دلیل غلظت بالای هیدروژن در مخلوط واکنش دهنده‌های نسوخته، هیدروژن به سمت ناحیه واکنش نفوذ می‌کند که با نتایج اشنایدر و همکارانش مطابقت دارد [۲۰]. مطابق شکل ۹ و در نزدیکی سرمشعل و در حالت طبقه‌ای اثر نفوذ مولکولی از مخلوط سرد نسوخته به ناحیه واکنشی و هسته‌ی شعله، با در نظر گرفتن اعداد اشمیت متفاوت برای گونه‌ها نسبت به حالت فرض عدد اشمیت برابر یک برای تمام گونه‌ها، دقیق‌تر مدل شده است، به طوری که در مرکز دامنه محاسباتی (بالای جسم پهن) کسر جرمی هیدروژن با استفاده از مدل اعداد اشمیت متفاوت حدوداً ۴ برابر بیشتر از مقدار محاسبه‌شده با مدل عدد اشمیت برابر یک به دست می‌آید. در حالت طبقه‌بندی شده به دلیل غنی بودن طبقه داخلی و در دسترس بودن هیدروژن بیشتر، کسر جرمی هیدروژن در نزدیکی خط مرکزی (هسته ناحیه واکنشی) در نزدیکی خروجی مشعل افزایش می‌یابد. مشخص نیست که چرا، در حالت پیش‌آمیخته، حتی پس از افزودن هیدروژن، نفوذ مولکولی بر کسر جرمی گونه‌های سبک مانند هیدروژن تأثیر چندانی نمی‌گذارد، در حالی که در حالت طبقه‌بندی شده، تأثیر دارد. فرض بر این است که این اثر ناشی از حالت پشتیبانی از پشت در حالت طبقه‌بندی شده باشد. از آنجایی که طبقه داخلی غنی‌تر است،

هیدروژن بیشتری در اینجا تولید می‌شود. این اثر در موارد بدون افزودن هیدروژن مشهود است (شکل ۸ (a, c, e)). علاوه بر این، ناحیه بازچرخشی در حالت پیش‌آمیخته وسیع‌تر است، بنابراین گونه‌های سبک زمان بیشتری برای انتشار به خارج از منطقه دارند. البته برای درک دقیق این موضوع، هنوز به تحقیقات بیشتری نیاز است. مطابق شکل ۸ و شکل ۹ و مقایسه حالت احتراق متان خالص و حالت غنی‌شده با هیدروژن (ستون سمت چپ و راست در این شکل‌ها)، افزایش شدید غلظت این رادیکال‌ها تحت اثر افزودن هیدروژن دیده می‌شود. غلظت بالای این رادیکال‌ها نشان‌گر واکنش‌پذیری بالاتر و پایداری بیشتر شعله است.

با توجه به تأثیراتی که در نظر گرفتن نفوذ مولکولی بر نتایج دارد، در ادامه‌ی شبیه‌سازی‌ها برای بررسی اثر افزودن مقادیر مختلف هیدروژن، از مدل دوم و با در نظر گرفتن اعداد اشمیت متفاوت برای گونه‌های مختلف استفاده شده است. کانتورهای دما شبیه سازی شده با افزودن ۲۰ و ۴۰ درصد حجمی هیدروژن در جریان سوخت در شکل ۱۰ نشان داده شده‌اند. با توجه به اهمیت مناطق با دمای بالا در تشکیل آلاینده‌ها، به ویژه آلاینده‌هایی که به دمای بالا حساس هستند، مانند ناکس، تنها مناطقی با دمای بیش از ۱۸۰۰ کلوین نشان داده شده‌اند. در حالت پیش‌آمیخته و با افزودن ۲۰ درصد حجمی هیدروژن دمای بیشینه از ۱۹۲۲ کلوین به ۱۹۴۵ کلوین می‌رسد که افزایش حدود ۱ درصدی را نشان می‌دهد، این در حالی است که در حالت طبقه‌ای این افزایش دما محسوس‌تر بوده و دمای بیشینه از ۲۱۳۶ به ۲۱۷۲ کلوین می‌رسد. با افزایش مقدار تزریق هیدروژن به ۴۰ درصد حجمی دمای بیشینه در حالت پیش‌آمیخته به ۱۹۶۰ کلوین می‌رسد و افزایش ۲ درصدی را نشان می‌دهد و در حالت طبقه‌ای دمای بیشینه به ۲۲۴۷ کلوین می‌رسد که افزایش حدود ۵ درصد است. افزایش محسوس‌تر دما در حالت طبقه‌ای به علت طبقه‌ی داخلی غنی‌تر و مقدار بیشتر هیدروژن در این ناحیه و بحث پشتیبانی از پشت در این نوع چیدمان است. در مورد میانگین دمای دامنه حل روند مشابهی مشاهده می‌شود. افزودن ۲۰ درصد هیدروژن در حالت پیش‌آمیخته و طبقه‌ای باعث افزایش ۵ درصدی دمای میانگین می‌شود و با افزودن ۴۰ درصد هیدروژن این افزایش در حالت پیش‌آمیخته به ۱۲ و در حالت طبقه‌ای به ۱۵ درصد می‌رسد. مطابق این شکل، افزودن هیدروژن ناحیه دما بالا را به میزان قابل توجهی طولانی‌تر می‌کند و حداکثر دما را در موارد طبقه بندی شده و پیش‌آمیخته افزایش می‌دهد. طولانی شدن ناحیه با دمای بالا با نتایج روحانی و همکاران [۳۹] در تناقض است. این تناقض را می‌توان به آن نسبت داد که در شبیه سازی آن‌ها، با افزودن هیدروژن بیشتر، توان حرارتی در حال کاهش بود در حالی که در این مطالعه توان حرارتی تقریباً ثابت است. با افزایش کسر حجمی هیدروژن، افزایش دما و افزایش طول ناحیه دما بالا محسوس‌تر می‌شود.

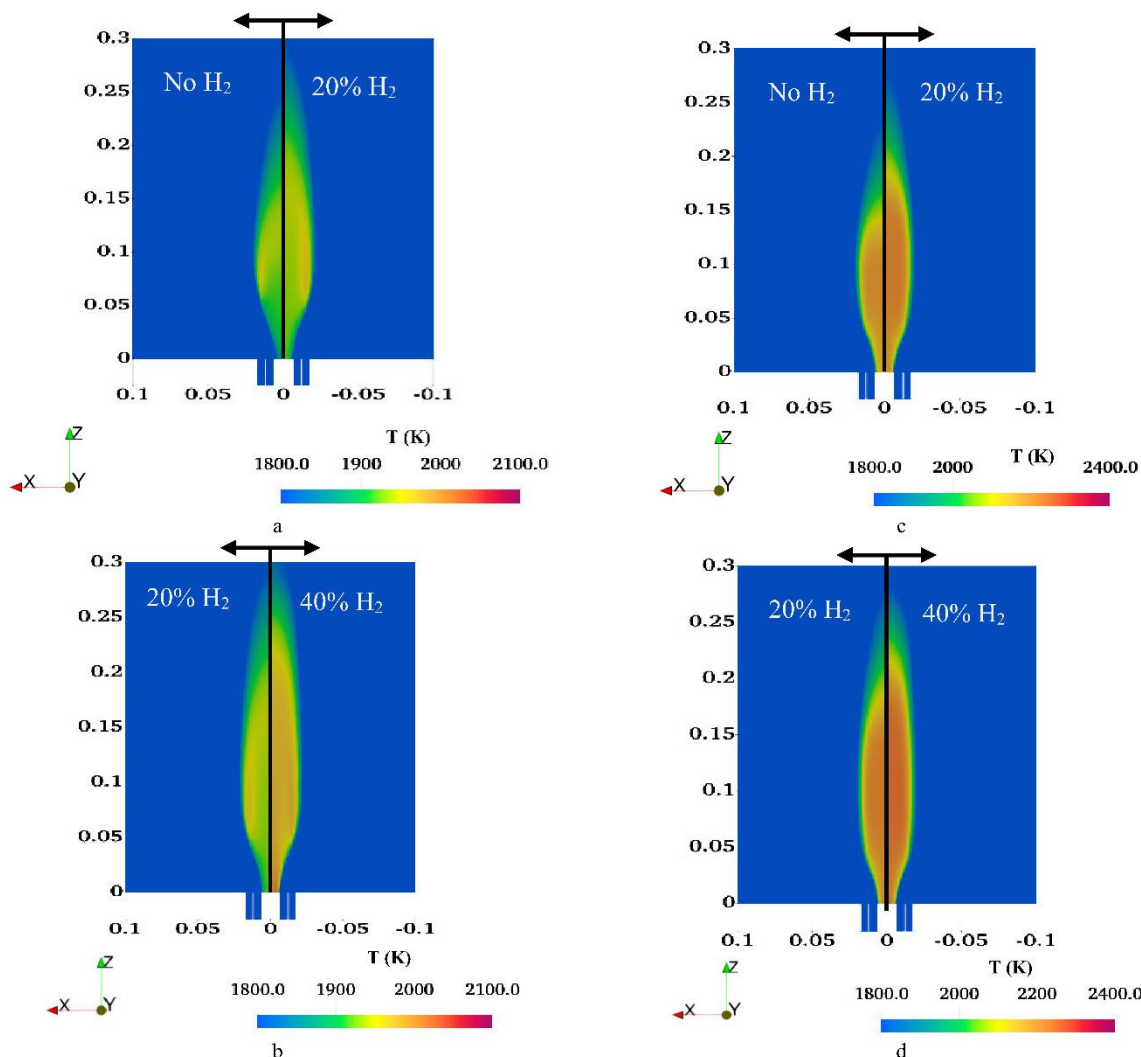


Figure 10- The contours of temperature by adding 20 and 40% of hydrogen on the volume of fuel basis. The cut off is applied to values less than 1800 K to indicate the high temperature zone. For case : a, b- premixed, c, d- stratified

شکل ۱۰- کانتور دما با افزودن ۲۰ و ۴۰ درصد حجمی هیدروژن. مقادیر کمتر از ۱۸۰۰ کلوین حذف شده‌اند تا منطقه دمای بالا نشان داده شود. برای حالت: a و b- پیش‌آمیخته c و d طبقه‌ای

نتیجه‌گیری

یک مشعل طبقه‌ای در این مقاله با استفاده از دو مدل نفوذ مولکولی مختلف در معادلات انتقال گونه‌ها مورد مطالعه قرار گرفت. در مدل اول، عدد اشمیت برای همه گونه‌ها برابر با یک بود و ضرایب معادله ساترلند برای همه گونه‌ها یکسان در نظر گرفته شده بود. در حالی که در مدل دوم اعداد اشمیت و ضرایب ثابت معادله ساترلند برای تمامی گونه‌ها مشخص و ثابت بودند. به منظور بررسی اثرات نفوذ مولکولی در احتراق طبقه‌ای و پیش‌آمیخته، به ویژه هنگامی که سوخت با هیدروژن غنی می‌شود، دو حالت مشعل کمبریج-سندیا مورد بررسی قرار گرفت، یک حالت پیش مخلوط (SwB2) و یک حالت طبقه‌ای (SwB6). نتایج نشان داد که در نظر گرفتن نفوذ مولکولی منجر به محاسبه دمای بالاتر در تمام حالات و مقاطع می‌شود. با این حال، در حالت پیش‌آمیخته، نفوذ ترجیحی چشم‌گیری برای گونه‌ی هیدروژن مشاهده نشد در حالی که در حالت طبقه‌ای نفوذ مولکولی به وضوح مشاهده شد. برای درک مناطقی که گرانشی آرام و گرانشی آشفته قابل مقایسه هستند، نسبت بین این متغیرها محاسبه شد، و نشان داده شد که افزودن هیدروژن باعث می‌شود گرانشی آرام در موارد پیش‌آمیخته و طبقه‌ای مهم باشد، اما در کل، در حالت طبقه بندی شده نفوذ مولکولی اهمیت بیشتری دارد. بسیاری از پارامترها، از جمله گرانشی آرام، در دسترس

بودن هیدروژن، آرام‌سازی مجدد جریان، ناحیه بازچرخشی، زمان ماند و انبساط حرارتی می‌توانند بر نفوذ مولکولی تأثیر بگذارند. در نهایت، اثر افزایش مقدار هیدروژن در جریان سوخت مورد مطالعه قرار گرفت و دو کسر حجمی متفاوت (۲۰ و ۴۰ درصد) هیدروژن به سوخت اضافه شد. نتایج نشان داد که با افزودن هیدروژن ناحیه دما بالا در راستای محوری گسترش یافته و دمای حداکثر افزایش یافت در حالی که طول و شدت ناحیه بازچرخشی با افزودن هیدروژن در همه موارد کاهش یافت. با افزودن هیدروژن بیشتر، میدان جریان و توزیع دما به طور قابل توجه‌تری تغییر کرد. همچنین افزایش غلظت رادیکال‌های فعال تحت اثر افزودن هیدروژن بیانگر افزایش واکنش‌پذیری و افزایش پایداری شعله و استقرار قوی‌تر آن است.

منابع

- [1] S. Leibovich, "Vortex stability and breakdown-Survey and extension," *AIAA journal*, vol. 22, no. 9, pp. 1192-1206, 1984.
- [2] O. Lucca-Negro and T. O'doherty, "Vortex breakdown: a review," *Progress in energy and combustion science*, vol. 27, no. 4, pp. 431-481, 2001.
- [3] A. N. Lipatnikov, "Stratified turbulent flames: Recent advances in understanding the influence of mixture inhomogeneities on premixed combustion and modeling challenges," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 62, pp. 87-132, 2017.
- [4] C. Galizzi and D. Escudié, "Experimental analysis of an oblique turbulent flame front propagating in a stratified flow," *Combustion and flame*, vol. 157, no. 12, pp. 2277-2285, 2010.
- [5] T. Kang and D. C. Kyritsis, "A combined experimental/computational investigation of stratified combustion in methane-air mixtures," *Energy Conversion and Management*, vol. 48, no. 11, pp. 2769-2774, 2007.
- [6] P. Anselmo-Filho, S. Hochgreb, R. Barlow, and R. Cant, "Experimental measurements of geometric properties of turbulent stratified flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 32, no. 2, pp. 1763-1770, 2009.
- [7] M. S. Day, X. Gao, and J. B. Bell, "Properties of lean turbulent methane-air flames with significant hydrogen addition," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, no. 1, pp. 1601-1608, 2011.
- [8] E. R. Hawkes and J. H. Chen, "Direct numerical simulation of hydrogen-enriched lean premixed methane-air flames," *Combustion and Flame*, vol. 138, no. 3, pp. 242-258, 2004.
- [9] G. S. Jackson, R. Sai, J. M. Plaia, C. M. Boggs, and K. T. Kiger, "Influence of H₂ on the response of lean premixed CH₄ flames to high strained flows," *Combustion and Flame*, vol. 132, no. 3, pp. 503-511, 2003.
- [10] J. Gauducheau, B. Denet, and G. Searby, "A numerical study of lean CH₄/H₂/air premixed flames at high pressure," *Combustion Science and Technology*, vol. 137, no. 1-6, pp. 81-99, 1998.
- [11] J. N. Phillips and R. J. Roby, "Enhanced gas turbine combustor performance using H₂-enriched natural gas," in *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air*, 1999, vol. 78590, p. V002T02A020: American Society of Mechanical Engineers.
- [12] S. V. Ghavami, A. Salavatizadeh, A. Javaheri, T. M. Masih, V. Esfahanian, and N. G. Hamzeh, "Kinetic Investigation on the Effects of Hydrogen Enrichment on Pollutants and Greenhouse Gases Emissions of Gas-Fuelled Engines in High Compression Ratio," 2016.
- [13] E. Do Sacramento, L. De Lima, C. Oliveira, and T. N. Veziroglu, "A hydrogen energy system and prospects for reducing emissions of fossil fuels pollutants in the Ceará state—Brazil," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 33, no. 9, pp. 2132-2137, 2008.
- [14] F. Halter, C. Chauveau, and I. Gökalp, "Characterization of the effects of hydrogen addition in premixed methane/air flames," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 32, no. 13, pp. 2585-2592, 2007.
- [15] T. Poinso and D. Veynante, *Theoretical and numerical combustion*. RT Edwards, Inc., 2005.
- [16] J. Nam and J. J. Yoh, "A numerical investigation of the effects of hydrogen addition on combustion instability inside a partially-premixed swirl combustor," *Applied Thermal Engineering*, vol. 176, p. 115478, 2020.
- [17] E. Bahmani, K. Mazaheri, and A. Alipour, "One-dimensional Combustion Simulation for Different Hydrogen-enriched Natural Gas Blends," *Amirkabir Journal of Mechanical Engineering*, vol. 53, no. 1, pp. 53-64, 2021.
- [18] M. D. E. Fateme Chitgarha, Mohammad Farshchi, "Simulation of a CH₄/H₂ diffusion flame using unsteady and steady flamelet combustion models (in Persian)," *Fuel and Combustion*, vol. 8, no. 2, pp. 71-84, 2015.
- [19] B. Kashir, S. Tabejamaat, and N. Jalalatian, "A numerical study on combustion characteristics of blended methane-hydrogen bluff-body stabilized swirl diffusion flames," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 4, no. 18, pp. 6243-6258, 2015.
- [20] S. Schneider, D. Geyer, G. Magnotti, M. J. Dunn, R. S. Barlow, and A. Dreizler, "Structure of a stratified CH₄ flame with H₂ addition," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 37, no. 2, pp. 2307-2315, 2019.
- [21] X. Wen, S. Hartl, A. Dreizler, J. Janicka, and C. Hasse, "Flame structure analysis of turbulent premixed/stratified flames with H₂ addition considering differential diffusion and stretch effects," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 38, no. 2, pp. 2993-3001, 2021.
- [22] A. Mardani, S. Tabejamaat, and M. Ghamari, "Numerical study of influence of molecular diffusion in the Mild combustion regime," *Combustion Theory and Modelling*, vol. 14, no. 5, pp. 747-774, 2010.
- [23] A. Salavati-Zadeh, V. Esfahanian, S. B. N. Najafi, H. Saeed, and M. Mohammadi, "Kinetic simulation of flameless burners with methane/hydrogen blended fuel: Effects of molecular diffusion and Schmidt number," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 43, no. 11, pp. 5972-5983, 2018.

- [24] K. K. Kuo, "Principles of combustion," 1986.
- [25] A. Lipatnikov, *Fundamentals of premixed turbulent combustion*. CRC Press, 2019.
- [26] E. Inanc, A. Kempf, and N. Chakraborty, "Scalar gradient and flame propagation statistics of a flame-resolved laboratory-scale turbulent stratified burner simulation," *Combustion and Flame*, vol. 238, p. 111917, 2022.
- [27] R. S. Barlow, M. J. Dunn, M. S. Sweeney, and S. Hochgreb, "Effects of preferential transport in turbulent bluff-body-stabilized lean premixed CH₄/air flames," *Combustion and Flame*, vol. 159, no. 8, pp. 2563-2575, 2012.
- [28] M. S. Sweeney, S. Hochgreb, M. J. Dunn, and R. S. Barlow, "The structure of turbulent stratified and premixed methane/air flames II: Swirling flows," *Combustion and Flame*, vol. 159, no. 9, pp. 2912-2929, 2012.
- [29] M. Valorani, F. Creta, D. A. Goussis, J. C. Lee, and H. N. Najm, "An automatic procedure for the simplification of chemical kinetic mechanisms based on CSP," *Combustion and Flame*, vol. 146, no. 1-2, pp. 29-51, 2006.
- [30] M. Sahebamei, E. Amani, and M. Nobari, "Numerical analysis of radial and angular stratification in turbulent swirling flames," *Energy*, vol. 173, pp. 523-539, 2019.
- [31] S. Zadsirjan, "A Large eddy simulation of the Sandia D, E, F flames using the developed variable ignition mixing layer to generate 2-D FGM table," *Fuel and Combustion*, vol. 12, no. 1, pp. 119-134, 2019. (in Persian)
- [32] K. M. Sobhan Emami Koopaei, Ali Shamoopour, "Numerical Study of the Transition from Turbulent Flame Jet to Detonation in a Tube with a Single Obstacle," *Fuel and Combustion*, vol. 6, no. 2, 2013. (in Persian)
- [33] E. Giacomazzi, F. Picchia, and N. Arcidiacono, "On the distribution of Lewis and Schmidt numbers in turbulent flames," in *30th Italian Meeting on Combustion, Ischia, Italy, 2007*: Citeseer.
- [34] F. C. Christo and B. B. Dally, "Modeling turbulent reacting jets issuing into a hot and diluted coflow," *Combustion and flame*, vol. 142, no. 1-2, pp. 117-129, 2005.
- [35] E. E. Fordoei, K. Mazaheri, and A. Mohammadpour, "Effects of hydrogen addition to methane on the thermal and ignition delay characteristics of fuel-air, oxygen-enriched and oxy-fuel MILD combustion," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 46, no. 68, pp. 34002-34017, 2021.
- [36] F. Wang, P. Li, J. Zhang, Z. Mei, J. Mi, and J. Wang, "Routes of formation and destruction of nitrogen oxides in CH₄/H₂ jet flames in a hot coflow," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 40, no. 18, pp. 6228-6242, 2015.
- [37] H. Turkeri, X. Zhao, S. B. Pope, and M. Muradoglu, "Large eddy simulation/probability density function simulations of the Cambridge turbulent stratified flame series," *Combustion and Flame*, vol. 199, pp. 24-45, 2019.
- [38] R. Zhou, S. Balusamy, M. S. Sweeney, R. S. Barlow, and S. Hochgreb, "Flow field measurements of a series of turbulent premixed and stratified methane/air flames," *Combustion and Flame*, vol. 160, no. 10, pp. 2017-2028, 2013.
- [39] B. Rohani and K. M. Saqr, "Effects of hydrogen addition on the structure and pollutant emissions of a turbulent unconfined swirling flame," *International Communications in Heat and Mass Transfer*, vol. 39, no. 5, pp. 681-688, 2012.

English Abstract

Investigating the effects of molecular diffusion and hydrogen-enrichment on methane-air stratified swirl flame

Amirreza Mohammadpour¹, Kiumars Mazaheri^{2*}, Alireza Alipoor³, Sajjad Rahimi⁴

1 -PhD candidate, Mechanical engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, ar.mohammadpour@modares.ac.ir

2-Professor, Mechanical engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, kiumars@modares.ac.ir

3-Assistant professor, Mechanical engineering, Shiraz University, Shiraz, Iran, a.alipoor@shirazu.ac.ir

4- MSc student, Mechanical engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, r.sajjad@modares.ac.ir

*Corresponding author

(Received: 2022/05/13, Received in revised form: 2022/08/03, Accepted: 2022/08/07)

In this article, Cambridge–Sandia stratified burner has been simulated by adding two different amounts of hydrogen to the fuel in order to investigate the effects of molecular diffusion in stratified and premixed combustion. For this purpose, two different models have been considered. In the first model, the Schmidt number is assumed to unity for all species, and in the second model, different Schmidt numbers have been used for each chemical species. The results show that by adding hydrogen in the stratified case, preferential diffusion of lighter species, affects the mass fraction of hydrogen, especially near the surface of the bluff body, and causes a 4-fold increase in the calculated value for its mass fraction. Therefore, molecular diffusion effects cannot be ignored in the governing equations. In the premixed case, although the molecular diffusion has little effect on the species concentration, it still is effective on the temperature distribution. By adding 40% of hydrogen, the maximum temperature increases by 2% and 5% and the average temperature increases by 12% and 15% in premixed and stratified cases, respectively. In general, increasing the amount of hydrogen changes the flame structure more significantly, especially regarding the recirculation zone above the bluff body, which becomes shorter with hydrogen addition.

Keywords: Molecular diffusion, Schmidt number, Stratified swirl burner, Turbulent combustion, Hydrogen enrichment