

مطالعه ساختار شعله متان هیدروژن در مشعل پیچشی سیدنی با استفاده از مدل احتراقی حجمی

آرمان حسن آبادی^۱، شیدوش وکیلی پور^{۲*}، رسول رحمتی^۳

۱- کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی هوافضا، دانشکدگان علوم و فناوری‌های میان‌رشته‌ای، دانشگاه تهران، تهران، ایران

arman.hasanabadi@ut.ac.ir

۲- دانشیار، دانشکده مهندسی هوافضا، دانشکدگان علوم و فناوری‌های میان‌رشته‌ای، دانشگاه تهران، تهران، ایران vakilipour@ut.ac.ir

۳- دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی هوافضا، دانشکدگان علوم و فناوری‌های میان‌رشته‌ای، دانشگاه تهران، تهران، ایران

rasoul.rahmati@ut.ac.ir

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۱/۱۸، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۴۰۳/۰۵/۱۵، پذیرش: ۱۴۰۳/۰۵/۱۷)

چکیده: در مصارف صنعتی، آلاینده‌های ناشی از احتراق سوخت‌های فسیلی در توربین‌های گازی نیروگاه‌ها در حال انتشار بوده و به همین جهت، بررسی انتشار آن‌ها به خصوص در شعله‌های غیرپیش‌آمیخته مورد اهمیت قرار می‌گیرد. در این پژوهش، با استفاده از شبیه‌سازی عددی در نرم‌افزار OpenFOAM، اثر افزودن هیدروژن به متان در شعله غیرپیش‌آمیخته متان و هوا بررسی می‌شود. بدین منظور، احتراق متان با هوا در مشعل پیچشی سیدنی (SM1) به وسیله مدل‌های آشفتگی $k-\epsilon$ و $k-\omega$ SST-SAS، مدل تابش P1 و مدل احتراق حجمی واکنشگاه اختلاط جزئی (PaSR) مدل‌سازی می‌شود. در این راستا، تأثیر دبی حجمی هیدروژن و افزایش دمای ناشی از آن بر ساختار شعله و گونه‌های احتراقی بررسی می‌شود. همچنین با استفاده از مدل‌سازی شبیه‌سازی گردابه بزرگ، الگوی ناحیه بازگردشی ثانویه در جریان غیرواکنشی متان و هوا نشان داده می‌شود. با افزودن هیدروژن در بالادست نواحی دما بالا از محور نازل به دلیل نفوذ سریع هیدروژن دور می‌شوند. همچنین با افزودن هیدروژن به دلیل ضعف مدل‌های میانگین‌گیری رینولدز و عدم محاسبه ناحیه بازگردشی ثانویه، نواحی با دمای بالا اندکی افزایش ارتفاع دارند. علت کاهش کربن دی‌اکسید در بالادست جریان، کمتر شدن مقدار سوخت هیدروکربنی و در پایین‌دست کامل نبودن احتراق و افزایش گونه کربن منواکسید است.

کلیدواژگان: شعله غیرپیش‌آمیخته، مشعل پیچشی سیدنی، مدل واکنشگاه اختلاط جزئی، OpenFOAM، احتراق هیدروژن

مقدمه

در سال‌های اخیر، مسئله گرم‌شدن جو زمین به یکی از بزرگ‌ترین نگرانی‌های بشر در زمینه محیط‌زیست تبدیل شده است. تحقیقات نشان داده است که میان افزایش گازهای گلخانه‌ای در جو و گرم‌شدن کره زمین ارتباط مستقیمی وجود دارد. در این میان، گازهای منواکسید و دی‌اکسید کربن به‌عنوان یکی از مهم‌ترین گازهای گلخانه‌ای شناخته شده که تجمع آن در جو زمین منجر به تغییرات قابل‌ملاحظه‌ای در شرایط آب و هوایی شده و این امر اثرات زیان‌باری برای حیات بشر در پی خواهد داشت. یکی از اصلی‌ترین منابع تولید گازهای منواکسید و دی‌اکسید کربن احتراق سوخت‌های فسیلی در موتورهای توربین‌های گازی است. امروزه، توربین‌های گازی به‌صورت گسترده در صنایع هوایی و تولید توان استفاده می‌شود. اما استفاده از این موتورها نیازمند کنترل انتشار آلاینده‌های ناشی از احتراق است [۱]. تلاش‌های زیادی در مسیر جایگزینی سوخت‌های مرسوم با

سوخت‌های سازگار با محیط و پاک انجام شده است. برای مثال افزودن هیدروژن به سوخت یا استفاده از آن به‌طور کامل به‌عنوان سوخت روش امیدوارکننده‌ای جهت رعایت قواعد سخت‌گیرانه زیست‌محیطی است [۱، ۲]. در چند سال گذشته استفاده از هیدروژن به‌عنوان سوخت افزودنی افزایش یافته است که دلایل آن می‌تواند، افزایش قیمت سوخت‌های فسیلی و اثر نامطلوب انتشار گازهای خروجی ناشی از احتراق سوخت‌های فسیلی بر شرایط جوی باشد. از مشخصه‌های سوخت خوب در دسترس بودن و احتراق پاک آن سوخت است که هیدروژن دارای این شاخصه‌ها است [۳]. افزودن هیدروژن عملکرد احتراق گاز طبیعی را بهبود بخشیده، انتشار کربن را کاهش داده و محدوده اشتعال گازهای طبیعی را گسترش می‌دهد.

در راستای بررسی تأثیر گاز هیدروژن بر احتراق متان و هوا و همچنین انتشار آلاینده‌های ناشی از آن، تحقیقات گسترده‌ای توسط محققین مختلف صورت گرفته است. عمادی و همکاران [۴] یک مطالعه تجربی جهت مشاهده تأثیر افزودن هیدروژن بر دینامیک شعله متان - هوا انجام و گزارش دادند که افزودن هیدروژن به متان، مشخصه‌های پایداری شعله مانند حد اشتعال و نرخ کرنش خاموشی را بهبود می‌بخشد و نرخ احتراق با افزودن هیدروژن به متان افزایش پیدا می‌کند. شفر و همکاران [۵] نشان دادند که افزودن هیدروژن به متان به مقدار قابل توجهی تشکیل کربن منواکسید را کاهش می‌دهد. بوربانو و همکاران [۶] نیز علت کاهش آلاینده‌ها توسط هیدروژن را این‌گونه بیان کردند که افزودن هیدروژن به متان تأثیر به‌سزایی در افزایش غلظت رادیکال OH دارد و این رادیکال‌ها اکسیداسیون کربن منواکسید به کربن دی‌اکسید را افزایش می‌دهد. راجپارا و همکاران [۳] نیز نشان می‌دهند که با ثابت بودن جریان سوخت حجمی افزودن هیدروژن موجب کاهش انتشار گونه‌های متشکل از کربن، افزایش دمای شعله، کاهش ابعاد شعله و کاهش انتشار CO می‌شود. به‌علت افزایش دمای شعله انتشار اکسیدهای نیتروژن NO_x افزایش می‌یابد. با ثابت بودن انرژی ورودی، شعله‌ها با غلظت هیدروژن بالاتر از نظر ابعاد کوتاه‌تر و گسترده‌تر هستند. مزیان و همکاران [۷] همچنین بیان می‌کنند که با تزریق مخلوط سوخت و هیدروژن به محفظه احتراق با سرعت ثابت، انتشار آلاینده‌هایی مانند کربن منواکسید و اکسیدهای نیتروژن کاهش می‌یابد. شیانگ و همکاران [۸] با مطالعه آثار فیزیکی و شیمیایی افزودن هیدروژن بر احتراق پیش‌آمیخته متان بیان می‌کنند که اثر شیمیایی هیدروژن موجب افزایش دمای آدیاباتیک شعله و اثر فیزیکی آن موجب کاهش نرخ گرمای آزاد شده می‌شود. رن و همکاران [۹] نیز گزارش کردند که با تغلیظ سوخت با هیدروژن، دمای آدیاباتیک شعله و سرعت اشتعال در حالت آرام افزایش می‌یابد. همچنین میزان تولید رادیکال‌های فعال H، O و OH وابسته به سرعت اشتعال در حالت آرام است. بویوکاکین [۱۰] و همکاران همچنین بیان می‌کنند که با افزودن هیدروژن به متان، انتشار کربن کاهش می‌یابد و این در حالی است که تشکیل NO حرارتی افزایش می‌یابد. فو و همکاران [۱۱] جهت بهبود عملکرد موتورهای گاز مایع متان و افزایش سرعت احتراق مخلوط، هیدروژن به سوخت افزودند و مشاهده کردند که ضمن افزایش سرعت احتراق مخلوط، با افزایش کسر انرژی هیدروژن، نرخ انرژی آزاد شده افزایش می‌یابد. آن‌ها همچنین مشاهده کردند که با افزایش کسر انرژی هیدروژن بین ۰ تا ۲۰ درصد، انتشار اکسیدهای نیتروژن افزایش می‌یابد، در حالی که انتشار کربن منواکسید و کربن دی‌اکسید به دلیل دمای احتراق بالاتر کاهش می‌یابد. در پژوهشی دیگر، ایشان [۱۲] سرعت اشتعال آرام مخلوط‌های زیست‌گاز- هیدروژن- هوا با نسبت‌های هم‌ارزی و ترکیب مختلف را مطالعه نموده و بیان کردند که سرعت اشتعال آرام تقریباً به‌صورت خطی با افزایش هیدروژن، افزایش یافته است. همچنین سینتیک شیمیایی سوخت بهبود و دمای آدیاباتیک شعله نیز افزایش یافته است. اوزتونا و همکاران [۱۳] نیز با استفاده از نرم‌افزار سیالاتی فلونت (Fluent) و مدل احتراقی فلیملت آرام پایه، جریان احتراقی را در محفظه احتراقی با پس‌فشار^۱ به صورت شعله غیرپیش‌آمیخته متان - هیدروژن و هوا حل کردند و مشاهده کردند که دمای شعله کاهش و اختلاط واکنش‌دهنده‌ها به تبع کاهش طول شعله، بهتر انجام می‌شود.

جهت اعتبارسنجی شبیه‌سازی موردنظر در این مقاله از مورد SMI شعله پیچشی سیدنی استفاده شده است. این نوع مشعل توسط محققین شبیه‌سازی عددی شده است که در ادامه به بعضی از آن‌ها اشاره می‌شود. در سال ۲۰۰۷، استین و

¹ Back-pressure

همکاران [۱۴] این مشعل را با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ، حل کردند. مدل احتراقی استفاده شده، مدل فلیملت پایا بر پایه مکانیزم جزئی بود. در این پژوهش، ایشان جهت اعتبارسنجی جریان غیرواکنشی از مورد^۱ غیرواکنشی N29S054 مشعل سیدنی استفاده کردند. برای اعتبارسنجی جریان واکنشی از نمونه شعله SMH1 که در آن سوخت ترکیبی از متان و هیدروژن است، استفاده کردند. در این تحقیق در کیس غیرواکنشی، پدیده شکست گردابه‌ای در جریان را بررسی کردند و دریافتند که این پدیده به مقدار چرخش بسیار حساس است. همچنین دریافتند که پیش‌بینی اثرات ناحیه گردابه‌ای اولیه (در اثر جسم جداکننده) بر تداخل بین جت سوخت و جریان چرخشی هوا، بسیار دشوار است.

در سال ۲۰۰۸، کمف و همکاران [۱۵] نیز این شعله را با هدف بررسی ساختار شعله و گرفتن نواحی بازگردشی جریان و همچنین پدیده شکست گردابه‌ای موجود در شعله‌ها بررسی کردند. در این مطالعه جهت بررسی جریان غیرواکنشی از مورد N29S054 و جریان واکنشی از موارد SM1، SMH1 و SMH2 استفاده کردند. نتایج نشان دادند که در جریان غیرواکنشی میان جریان آشفته و گرفتن نواحی بازگردشی و همچنین شکست گردابه‌ای تطابق وجود دارد. اما در موارد واکنشی، رضایت کمی از نتایج حاصل شد. با این وجود روش شبیه‌سازی گردابه بزرگ توانایی خود را در نمایش حالت ناپایداری شعله نشان داد.

در سال ۲۰۱۵، کشیر و همکاران [۱۶] نیز بر روی این شعله مطالعاتی انجام دادند. مطالعات آن‌ها شامل بررسی اثرات افزودن هیدروژن با مقدار مختلف [۱۵] به متان و تأثیر آن بر شاخصه‌های احتراقی (مقدار حداکثر دما در شعله و انتشار کربن دی‌اکسید) این شعله بود. در این بررسی از مدل فلیملت همراه با بررسی اثرات تشعشع به همراه مدل آشفستگی $k - \epsilon$ استفاده شد. همچنین اثرات عدد چرخش با سه مقدار $0/3$ ، $0/5$ و $0/6$ بررسی شد. نتایج بیانگر این موضوع بود که هرچند که نرخ کاهش طول شعله رابطه عکس با مقدار چرخش دارد اما با افزودن هیدروژن، طول شعله کاهش می‌یابد. همچنین با افزایش مقدار هیدروژن، ناحیه با بالاترین مقدار دما به سمت بالا دست و نزدیک صفحه خروجی سوخت انتقال می‌یابد و مقدار کربن منواکسید کاهش می‌یابد.

در مطالعات قبلی بر روی شعله مورد SM1 در مشعل پیچشی سیدنی از مدل‌های احتراقی فلیملت به همراه مدل آشفستگی $k - \epsilon$ استفاده شده است. در این مقاله در جهت کسب نتایج دقیق‌تر گونه‌های احتراقی سعی بر استفاده از مدل‌های نرخ محدود مانند مدل واکنشگاه اختلاط جزئی^۲ است. همچنین جهت استفاده از مدل آشفستگی SST-SAS $k-\omega$ که نتایج خوبی در بررسی جریانات برشی ارائه کرده است، اعتبارسنجی بر روی آن در مسائل احتراقی مدنظر صورت می‌گیرد. تأثیر افزودن هیدروژن بر مشخصات فیزیکی و شیمیایی شعله SM1 و بررسی اثر احتراق بر میدان جریان سوخت و اکسیدکننده با استفاده از نرم‌افزار OpenFOAM^۳ شبیه‌سازی شده و نتایج عددی با مقادیر آزمایشگاهی شعله مورد SM1 در مشعل پیچشی سیدنی مقایسه می‌شود. همچنین به‌منظور آشکارسازی ناحیه بازگردشی دوم، جریان غیرواکنشی با رهیافت شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ^۴ تحلیل شده است. نتایج شبیه‌سازی حاکی از موفقیت رهیافت شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ در پیش‌بینی نواحی بازگردشی با گردایان پایین است.

معادلات حاکم، مدل‌سازی و روش عددی

معادلات حاکم بر جریان احتراقی آشفته عبارتند از معادلات بقای جرم، بقای تکانه، انتقال انرژی و انتقال گونه‌ها. در جریان‌های واکنشی به دلیل ثابت نبودن چگالی بایستی جریان را تراکم‌پذیر در نظر گرفت. یعنی توسط احتراق، چگالی به صورت تابعی از مکان تغییر می‌کند. در این حالت به دلیل وجود نوسانات در چگالی، با متوسط‌گیری رینولدز ترم‌های جدیدی ایجاد می‌شود که بستن سیستم معادلات را دشوار می‌سازد. جهت کاهش این ترم‌ها از میانگین‌گیری به نام میانگین‌گیری فاور استفاده می‌شود.

¹ Case

² Partially Stirred Reactor

³ Open-Source Field Operation And Manipulation

⁴ Large Eddy Simulation

در این روش میانگین سرعت به صورت $\bar{u} = \frac{\rho \bar{u}}{\rho}$ بیان می‌شود. همچنین میزان سرعت لحظه‌ای به صورت $u = \bar{u} + u''$ بیان می‌شود. حال ترم u'' شامل نوسانات چگالی نیز است. در ادامه معادلات انتقالی که به روش فاوور جهت مدل‌سازی جریان احتراقی آشفتگی متوسط‌گیری شده‌اند، مورد بررسی قرار می‌گیرد.

معادلات تکانه و پیوستگی با متوسط‌گیری فاوور به شکل زیر است [۱۷]:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{p} \bar{u}_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\bar{p} \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{p} \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''})] \quad (2)$$

که در آن ρ چگالی مخلوط، u_j مؤلفه سرعت در راستای x_j می‌باشند. τ_{ij} بیانگر تانسور تنش ویسکوز است. لزجت آرام μ را می‌توان با استفاده از قانون ساترلند^۱ و یا قانون ویلکه^۲ محاسبه کرد. در این تحقیق به دلیل استفاده از هیدروژن و اختلاف قابل توجه عدد لوییس^۳ هیدروژن با هیدروکربن‌ها مانند متان، بایستی از مدل ویلکه استفاده کرد. عدد لوییس یک گونه عدد بی‌بعدی است که بیانگر نسبت ضریب انتقال حرارت به روش نفوذ به ضریب انتقال جرم آن گونه است که به صورت زیر است:

$$Le = \frac{D_{th}}{D_k} \quad (3)$$

این عدد به علت تغییرات ناچیز آن برای هیدروکربن‌ها، یک در نظر گرفته می‌شود اما مقدار آن برای هیدروژن 0.3 است [۱۸]. در ساده‌نویسی معادله انرژی فرض برابر با یک این مدل بسیار کمک کننده است و سپس با تقریب خوبی می‌توان از قانون ساترلند برای محاسبه لزجت آرام استفاده کرد. اما با حضور هیدروژن دیگر امکان این کار نیست و نمی‌توان ضریب انتقال حرارت به صورت دیفیوژن را با ضریب انتقال جرم برابر قرار داد و بایستی از قانون ویلکه استفاده کرد. همچنین معادله انتقال جرم گونه با متوسط‌گیری فاوور به صورت زیر است:

$$\frac{\partial (\bar{p} \bar{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{V}_{k,i} \bar{Y}_k + \bar{\rho} \overline{u_i'' Y_k''}) + \bar{\omega}_k \text{ for } k = 1, N \quad (4)$$

جز i ام سرعت دیفیوژن برای گونه k ام و $\bar{\omega}_k$ نرخ تولید یا مصرف گونه‌ها است. این ترم مهمترین ترم موجود در جریان واکنشی است. با جمع کردن تمامی معادلات گونه‌ها بایستی پایستگی جرم برقرار شود و طرف راست معادله برابر صفر شود. این شرط حکم می‌کند که رابطه زیر برای سرعت دیفیوژن گونه‌ها برقرار باشد:

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_{k,i} = 0 \quad (5)$$

مقدار ترم $\bar{\rho} \overline{u_i'' Y_k''}$ با فرض کلاسیک گرادینان^۴ به صورت زیر بسته می‌شود:

$$\bar{\rho} \overline{u_i'' Y_k''} = - \frac{\mu_t}{Sc_{kt}} \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_i} \quad (6)$$

که در آن Sc_{kt} عبارتند از ویسکوزیته توربولانس و عدد اشمیت توربولانس برای گونه k ام. ترم دیگر که مربوط به سرعت دیفیوژن گونه‌هاست بعد از تعیین رابطه برای آن، مقدار آن متوسط‌گیری و مشخص می‌شود. برای مثال معمولاً به صورت زیر مدل می‌شود:

¹ Sutherland Law

² Wilke Law

³ Lewis Number

⁴ Classical gradient assumption

$$\overline{V_{k,i} Y_k} = -\rho D_k \frac{\partial \overline{Y_k}}{\partial x_i} \approx -\bar{\rho} \overline{D_k} \frac{\partial \overline{Y_k}}{\partial x_i} \quad (7)$$

$\overline{D_k}$ ضریب دیفیوژن میانگین گونه‌ها است. جهت به‌دست آوردن مقدار $\overline{V_{k,i} Y_k}$ برای N گونه بایستی سیستم معادلات خطی به سائز N^2 را حل کرد که بسیار هزینه‌بر است. در صورتی که گرادیان فشار کم و از نیروهای حجمی صرف‌نظر شود، راه دیگر استفاده از قانون فیک^۱ است (رابطه) که دارای خطای زیادی به‌دلیل تخمین است. علت آن هم این است که تنها هرگونه نسبت به یک گونه دیگر سنجیده می‌شود و تعامل با دیگر گونه‌ها در نظر گرفته نمی‌شود. روش دیگر مدل تخمین هرشفلدر و کورتیس^۲ [۱۹] است که بهترین تخمین مرتبه اول برای سیستم معادلات ذکر شده است و در این مطالعه هم از این مدل استفاده می‌شود.

در مسائل جریان‌های واکنشی به روش‌های متعددی می‌توان معادله انرژی یا میزان انرژی ناشی از احتراق را نشان داد. لیکن بایستی در ذهن این موضوع را داشت که همگی آن‌ها بیانگر قانون پایستگی انرژی می‌باشند. یکی از روش‌های مرسوم معادله انرژی با استفاده از آنتالپی محسوس است. آنتالپی محسوس h_s به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$h_s = h - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 Y_k \quad (8)$$

$$h_s = \int_{T_0}^T C_{p_s}(T) dT \quad (9)$$

ترم دوم سمت راست معادله ۸، بیانگر آنتالپی تشکیل N گونه موجود در مخلوط است. در معادله (۹)، $C_{p_s}(T)$ ظرفیت گرمایی ویژه گونه در فشار ثابت و دمای T است. آنتالپی تشکیل گونه‌های مختلف را می‌توان در جداول ترموشیمی JANAF یافت و استفاده کرد. همچنین چند جمله‌ای‌هایی جهت محاسبه ظرفیت گرمایی گونه‌های مختلف نیز در دسترس قرار گرفته است که می‌توان از آن‌ها در کدهای شبیه‌سازی جریان واکنشی استفاده کرد [۲۰].

معادله انتقال انرژی به‌صورت زیر است:

$$\frac{\partial [(\bar{\rho}(h_s+k))] }{\partial t} + \frac{\partial [\bar{\rho} \overline{u_i (h_s+k)}]}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \rho u_i h_s'' - \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \sum_{k=1}^N h_{s,k} \overline{V_{k,i} Y_k}) + \overline{\dot{\omega}_h} + \overline{S_r} \quad (10)$$

که در آن K انرژی جنبشی، λ ضریب رسانایی گرمایی، $\dot{\omega}_h$ گرما یا انرژی ناشی از احتراق و S_r ترم ناشی از انتقال گرما به روش تشعشع است. همان‌طور که در سمت راست معادله ۱۰ مشاهده می‌شود، جهت بیان سرعت دیفیوژن از رابطه مدل تخمین هرشفلدر و کورتیس استفاده شده است.

$\dot{\omega}_h$ به‌صورت رابطه $(\dot{\omega}_h = -\sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k)$ با نرخ تولید یا مصرف گونه‌ها رابطه دارد. ترم $(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i})$ به‌صورت زیر بسته

می‌شود:

$$\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = \bar{\lambda} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (11)$$

$\bar{\lambda}$ بیانگر ضریب انتقال حرارت میانگین است.

مدل واکنشگاه اختلاط جزئی

این مدل احتراقی که از دسته مدل‌های احتراق حجمی است، مدلی نرخ محدود بوده و از آن برای تخمین برهمکنش احتراق و آشفستگی استفاده می‌شود. همچنین در این مدل، هر سلول محاسباتی به دو ناحیه واکنشی و غیرواکنشی همگن تقسیم می‌شود. در این مدل ناحیه ریزساختار واکنشگاه اختلاط کامل^۳ ناپایا در نظر گرفته می‌شود و با استفاده از این تعریف مقدار

¹ Fick

² Hirschfelder and Curtis

³ Perfectly Stirred Reactor

کسر جرمی گونه در درون ناحیه واکنشی Y_k^* محاسبه می‌شود. در هر سلول کسری به عنوان کسر واکنشی K به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۱]:

$$K = \frac{\tau_c}{\tau_k + \tau_c} \quad (12)$$

که در آن τ_c ، τ_k و K به ترتیب مقیاس زمانی شیمیایی، مقیاس زمانی اختلاط و پارامتر اختلاط (کسر واکنشی) هستند. مقیاس زمانی اختلاط با استفاده از پارامترهای میدان آشفته با رابطه زیر محاسبه می‌شود [۲۲]:

$$\tau_k = C_{mix} \sqrt{\frac{\mu_{eff}}{\rho \varepsilon}} \quad (13)$$

در رابطه (۲)، μ_{eff} لزجت مؤثر (مجموع لزجت مولکولی و آشفته)، ε نرخ اضمحلال انرژی جنبشی و C_{mix} ثابتی جهت تنظیم مقیاس زمانی اختلاط است. این ثابت از مقدار 0.1 تا 0.3 بسته به مسئله مورد نظر انتخاب می‌شود. در این شبیه‌سازی از مقدار 0.1 استفاده شده است. مقدار مقیاس زمانی شیمیایی از روابط متعددی محاسبه می‌شود که در این پژوهش از رابطه زیر استفاده می‌شود [۲۳]:

$$\tau_c = \frac{n_r * cTot^*}{\sum_{n=1}^{n_r} ((dc_{n_r,forward}^*/dt) * V_{n_r,sum})} \quad (14)$$

که در آن n_r ، $cTot^*$ و $V_{n_r,sum}$ تعداد واکنش، مقدار کل غلظت گونه‌ها (بدست آمده از قانون گاز ایده‌آل) و جمع ضرایب استوکیومتریک محصولات است. $dc_{n_r,forward}^*/dt$ نرخ واکنش رفت است. در نهایت با محاسبه K می‌توان رابطه زیر را برای مقدار میانگین نرخ واکنش ارائه کرد:

$$\bar{\omega}_k = \kappa \frac{\bar{\rho}}{\tau^*} (Y_k^* - Y_k^0) = \kappa \dot{\omega}_k^* \quad (15)$$

که در آن τ^* مقدار زمان اقامت جریان سیال در ریزساختار است. مقدار زمان اقامت جریان نیز با استفاده از مقدار میدان جریان آشفته محاسبه می‌شود.

$$\tau^* = C_\tau \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}} \quad (16)$$

در رابطه (۵)، مقدار C_τ برابر با 0.4083 است.

در این تحقیق شبیه‌سازی عددی شعله پیچشی سیدنی مورد SM1 با استفاده از نرم‌افزار OpenFOAM انجام شده است. جمله $\overline{\rho u_i u_j}$ در معادله بقای تکانه با استفاده از مدل‌های آشفته‌گی $k-\varepsilon$ و $k-\omega$ SST-SAS [۲۴] جهت شبیه‌سازی جریان احتراقی و روش شبیه‌سازی گردابه بزرگ [۲۵] جهت شبیه‌سازی جریان غیراحتراقی محاسبه می‌شوند. البته بایستی ذکر شود که معادلات مذکور در روش شبیه‌سازی گردابه بزرگ فیلترگیری می‌شوند و می‌توان جهت بررسی معادلات آن به مقاله پیچ^۱ و همکاران [۲۶] رجوع کرد.

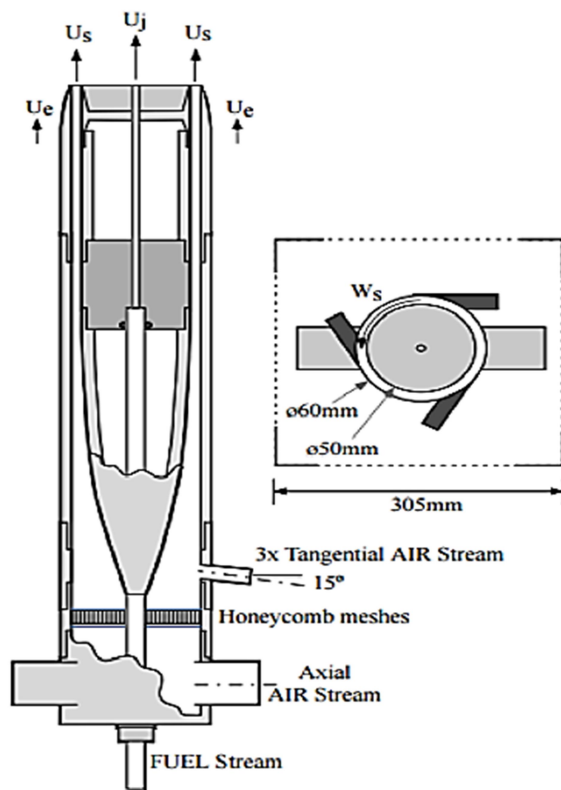
همچنین جمله $\bar{\omega}_k$ در سمت راست معادله انتقال گونه‌ها و جمله انرژی آزاد شده ناشی از احتراق با استفاده از مدل احتراقی واکنشگاه اختلاط جزئی محاسبه می‌شود. محاسبات سینتیک شیمیایی با استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI-Mech 3.0 شامل ۵۳ گونه و ۳۲۵ واکنش صورت می‌پذیرد [۲۷]. در این بررسی از مدل حرارت تابشی PI استفاده شده و

¹ Pitsch

همگیرسازی میدان‌های سرعت و فشار به وسیله الگوریتم PISO صورت پذیرفته است. عدد کورانت^۱ در شروع حل میدان جریان برابر با ۰/۲ در نظر گرفته شده و پس از پایداری عددی حل، مقدار آن به ۰/۵ تغییر می‌یابد. عبارات جابجایی و نفوذ در معادلات حاکم به ترتیب با دقت مرتبه اول و دوم گسسته شده‌اند. جهت حل جریان غیراحتراقی به روش شبیه‌سازی گردابه بزرگ نیز همگیرسازی میدان‌های سرعت و فشار به وسیله الگوریتم PIMPLE صورت پذیرفته است مقدار عدد کورانت جهت شبیه‌سازی جریان غیراحتراقی با ۰/۶ شروع و پس از پایداری حل با مقدار ۰/۹ ادامه می‌یابد. عبارات مشتق زمانی در معادلات تکانه و دیگر معادلات به ترتیب با دقت مرتبه دوم و اول و عبارات جابجایی و نفوذ با دقت مرتبه دوم گسسته شده‌اند.

مشعل سیدنی

مشعل پیچشی سیدنی، مشعلی پیچشی با فتاوری جت مماسی است که به صورت تجربی در دانشگاه سیدنی مورد پژوهش واقع و نتایج آن ارائه شد [۲۸]. در این مشعل جت سوخت در مرکز مشعل با قطری به اندازه ۳/۶ میلی‌متر است و جسم جداکننده‌ای از جنس سرامیک به قطر ۵۰ میلی‌متر تعبیه شده است. جهت تأمین هوای موردنیاز به عنوان اکسیدکننده در اطراف جسم جداکننده لوله‌ای به ضخامت ۰/۲ میلی‌متر در خروجی مشعل قرار داده شده است. هوای مورد نیاز جهت ایجاد چرخش از سه ورودی با قطر ۵ میلی‌متر که نسبت به یکدیگر با زاویه ۱۲۰ درجه قرار گرفته‌اند و با افق زاویه ۱۵ درجه می‌سازند، تأمین می‌شود. هوای محوری نیز از دو ورودی با قطر ۲۵ میلی‌متر با فاصله ۴۴۷ میلی‌متری از سطح خروجی مشعل



شکل ۱- طرح‌واره مشعل سیدنی به همراه نمایی از مقطع ورودی مشعل [۳۰].

Figure 1- Schematic of the Sydney burner with a cross section of the burner inlet.

¹ Courant Number

تأمین می‌شود. این مشعل در تونل بادی با سطح مقطع عرضی 130×130 و با سرعت ۲۰ متر بر ثانیه قرار دارد [۲۸]. عدد میزان پیچش هوای پیچشی موجود در این مشعل ۰/۵ است. در این بررسی از مورد SMI که دارای عدد پیچش ۰/۵ و سوخت آن متان است استفاده شده است. دیگر شرایط شعله از جمله عدد رینولدز و غیره که بیانگر مورد SMI می‌باشند، در بخش شبکه‌بندی و شرایط مرزی بیان شده است.

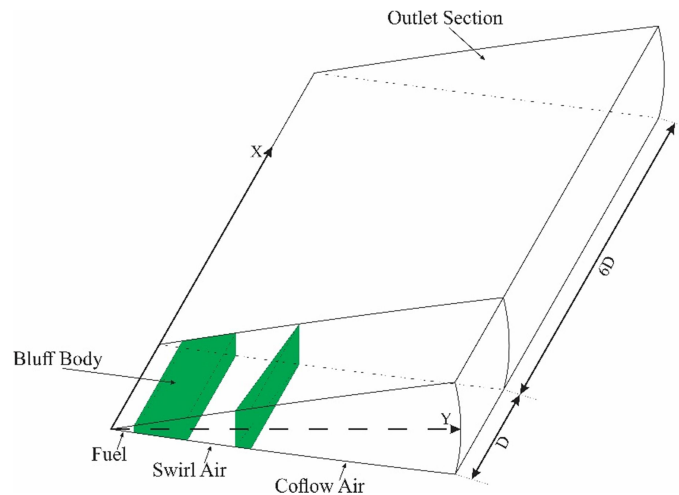
در شعله تشکیل شده، گلوگاه در فاصله‌ای در حدود ۵۰ میلی‌متر از سطح جسم جداکننده شکل می‌گیرد. همچنین اندازه‌گیری‌ها نشان می‌دهند که در فاصله ۴۳ میلی‌متری پایین دست جسم جداکننده، ناحیه بازگردشی وجود دارد که سرعت آن به صفر رسیده و ساکن می‌شود. ناحیه بازگردش ثانویه از ۶۵ تا ۱۱۰ میلی‌متر در پایین دست تا شعاع ۱۰ میلی‌متر گسترش می‌یابد [۲۸]. جت سوخت در فاصله ۷۰ میلی‌متری از سطح خروجی کاهش شدید سرعت را متحمل می‌شود و نتیجتاً ساکن می‌شود. همچنین در فاصله ۶۰ میلی‌متری پایین دست، وجود ناحیه گازی و چرخشی گزارش شده است.

شرایط مرزی و شبکه‌بندی

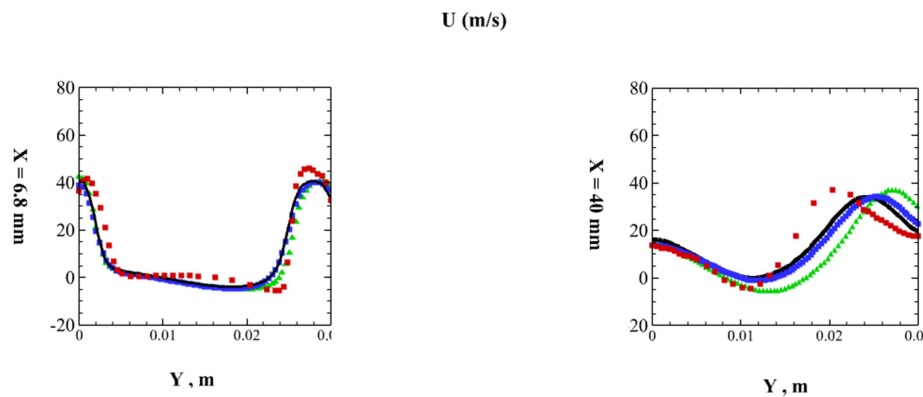
عدد رینولدز جت سوخت ۷۲۰۰ و جریان هوای پیچشی ۷۵۹۰۰ است. در ورودی جت سوخت، سوخت متان با سرعت ۳۲/۸ متر بر ثانیه وارد محفظه می‌شود. مقدار کسر جرمی ورودی متان نیز ۱ در ورودی سوخت و در دیگر ورودی‌ها صفر در نظر گرفته می‌شود. در ورودی جریان پیچشی هوا، سرعت مؤلفه مماسی آن ۱۹/۱ متر بر ثانیه و سرعت مؤلفه محوری آن ۳۸/۲ متر بر ثانیه است. کسر جرمی اکسیژن ۰/۲۳ و کسر جرمی نیتروژن ۰/۷۷ در نظر گرفته می‌شود. سرعت ورودی هوای تونل باد ۲۰ متر بر ثانیه بوده و مقدار گرادیان سرعت در خروجی برابر با صفر است. مقدار گرادیان فشار در تمامی ورودی‌ها برابر صفر و در مرز خروجی فشار برابر با فشار محیط در نظر گرفته می‌شود. مقدار دما در ورودی برابر با ۳۰۰ کلوین و گرادیان آن در مرز خروجی برابر با صفر در نظر گرفته می‌شود. جهت شبیه‌سازی شعله مورد SMI در مشعل پیچشی سیدنی به علت وجود تقارن محوری در این مشعل از یک شبکه‌بندی دوبعدی به شکل گوه^۱ استفاده شده که هندسه و نام‌گذاری ورودی‌ها، خروجی و ابعاد آن در شکل ۱ نشان داده شده است. همچنین شبکه‌ها براساس مختصات استوانه‌ای تولید شدند. اما محاسبات عددی در نرم‌افزار OpenFOAM بر اساس مختصات کارتزین صورت می‌گیرد. جهت اطمینان از پایداری حل بین دو سیستم مختصاتی، صفحه $z = 0$ به‌عنوان صفحه مبدأ انتخاب شد. در این صفحه X, Y و جهت عمود بر این صفحه متناسب است با جهت محوری، جهت شعاعی و جهت مماسی. مؤلفه‌های سرعت موجود نیز از همین قرارداد پیروی می‌کنند. u, v و ω بیانگر سرعت محوری، سرعت شعاعی و سرعت مماسی می‌باشند.

جهت بررسی استقلال حل از شبکه در شبیه‌سازی موردنظر، سه شبکه با تعداد سلول ۲۱۰۰۰، ۴۱۰۰۰ و ۶۴۰۰۰ در نظر گرفته شده است. در شکل ۲، نتایج حل میدان جریان روی این سه شبکه برای مؤلفه محوری سرعت در دو مقطع محوری ۶/۸، ۲۰ و ۴۰ میلی‌متر نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که اختلاف بین دو شبکه با تعداد ۴۱۰۰۰ و ۶۴۰۰۰ قابل چشم‌پوشی است. از این‌رو، به‌منظور کاهش زمان شبیه‌سازی از شبکه با تعداد سلول ۴۱۰۰۰ استفاده می‌شود.

¹ Wedge



شکل ۲- هندسه محاسباتی تقارن محوری مشعل سیدنی با زاویه ۵ درجه
Figure 2- Axisymmetric computational domain of Sydney burner with an angle of 5 degree



شکل ۳- اثر شبکه بر مولفه محوری سرعت در نقاط محوری مختلف در سه شبکه‌بندی با ۲۱۰۰۰، ۴۱۰۰۰ و ۶۴۰۰۰ سلول محاسباتی. مربع-های قرمز بیانگر نتایج آزمایشگاهی شعله، خط مشکی شبکه با ۴۱۰۰۰ سلول، مثلث‌های سبز شبکه با ۶۴۰۰۰ سلول و مربع‌های آبی شبکه با ۲۱۰۰۰ سلول می‌باشند.

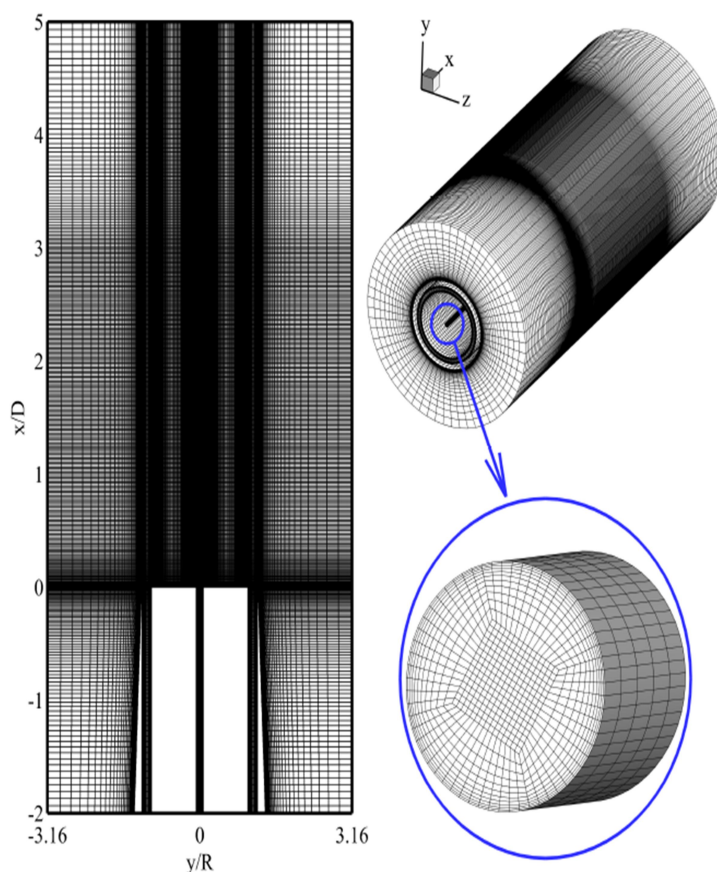
Figure 3- Effects of grids resolution on the axial component of velocity at different axial locations calculated on the grids with 21000, 41000 and 64000 computational cells. The red squares represent the experimental results of the flame, the black line is the grid with 41,000 cells, the green triangles are the grid with 64,000 cells, and the blue squares are the grid with 21,000 cells

همچنین جهت شبکه‌بندی و انتخاب تعداد شبکه به منظور بررسی تأثیرات احتراق و افزایش دما در میدان سرعت این شعله و همچنین بررسی دو ناحیه بازگردشی شعله سیدنی، جریان غیرواکنشی متان و هوا با شرایط کاملاً مشابه شعله SMI با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه بزرگ، به صورت سه‌بعدی و با استفاده از استوانه‌ای با ارتفاع ۳۵۰ میلی‌متر و شعاع ۸۰ میلی‌متر صورت گرفته است. مشخصات میدان محاسباتی موردنظر در شکل ۳ نشان داده شده است. جهت اطمینان از توسعه یافتن جریان در قسمت خروجی هندسه، براساس پیشنهاد یانگ و همکاران [۲۹] جریان ورودی از بعد از عبور از لوله‌ای با طول ۱۰۰ میلی‌متر وارد محفظه احتراق می‌شود. همچنین در این شبیه‌سازی از شرط مرزی دریکلت^۱ در ورودی‌های سرعت،

¹ Dirichlet

سوخت، دما و فشار خروجی استفاده شد. از شرط مرزی نیومان^۱ در خروجی‌های سرعت، دما، گونه‌ها و فشار ورودی استفاده شد. با استفاده از روش لوند [۳۰]، شرایط مرزی آشفته نیز برای این روش اعمال و جهت مدل‌سازی زیرشبکه از مدل ویل^۲ استفاده شد. بدلیل وجود یکی از فرض‌های موجود در حلگر ReactingFOAM یعنی ثابت و برابر یک بودن مقدار عدد لوییس^۳ (Le)، ژونگ^۴ و همکاران [۳۱] حلگری بر پایه حلگر ReactingFOAM با نام ReactingDNSMix توسعه دادند و آن را اعتبارسنجی کردند تا بتوان از آن برای سوخت حاوی هیدروژن با عدد لوییس ۰/۳ نیز استفاده کرد که به دلیل استفاده از سوخت هیدروژن در این پژوهش استفاده شد.

جهت بررسی اثر میزان دقت و وضوح شبکه از چهار نوع شبکه به ترتیب G1، G2، G3، G4 با تعداد سلول‌های ۱/۸، ۲/۷، ۳/۷ و ۴/۷ استفاده شده است. همچنین اعتبارسنجی شبکه‌ها با استفاده از شرایط مورد غیراحتراقی N29S054 انجام می‌شود. نتایج با نتایج آزمایشگاهی ال عبدلی^۵ و همکاران [۳۲] و نتایج شبیه‌سازی مالالاسکارا^۶ و همکاران [۳۳] مقایسه شد. همچنین



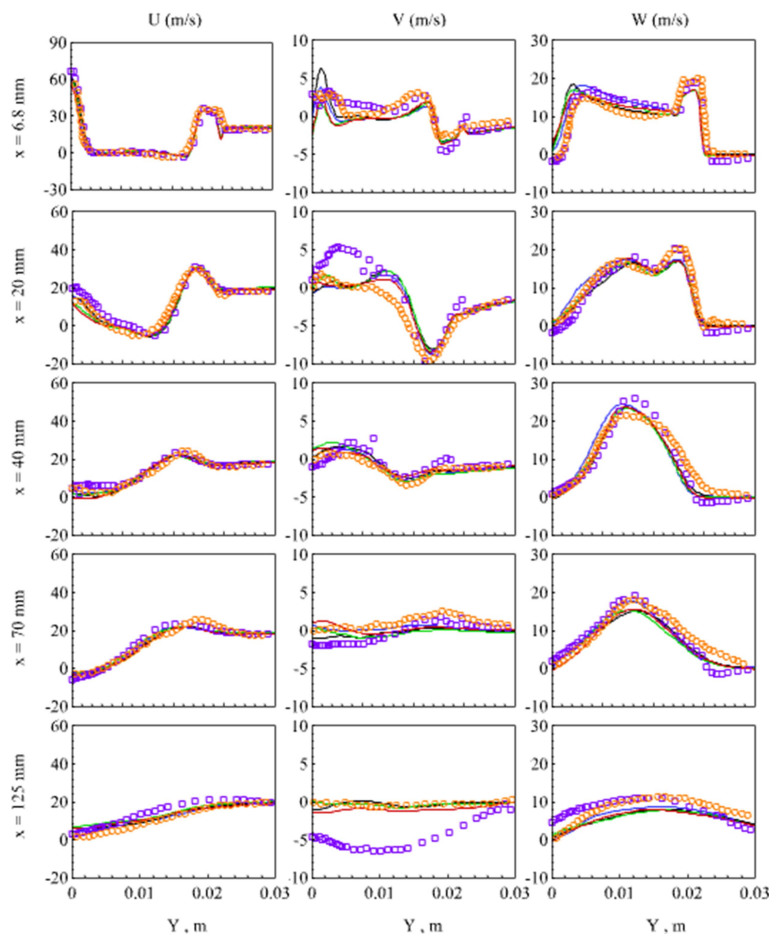
شکل ۴- نماهای دو و سه بعدی شبکه بندی برای شبیه‌سازی گردابه بزرگ. نمای شبکه‌بندی در سطح خروجی نازل سوخت و جسم جداکننده.

Figure 4- 2D and 3D view of employed mesh for large eddy simulation. Grid distribution around the exit surface of the fuel nozzle and bluff body.

¹ Neumann
² WALE
³ Lewis number
⁴ Zhong
⁵ Al Abdeli
⁶ Malalasekara

همانند هندسه تولید شده فیلی، شبکه‌ها براساس مختصات استوانه‌ای تولید شدند. اما محاسبات عددی در نرم‌افزار OpenFOAM بر اساس مختصات کارتزین صورت می‌گیرد. جهت اطمینان از پایداری حل بین دو سیستم مختصاتی، صفحه $Z = 0$ به‌عنوان صفحه مبدأ انتخاب شد. در این صفحه X, Y و جهت عمود بر این صفحه متناسب است با جهت محوری، جهت شعاعی و جهت مماسی. مؤلفه‌های سرعت موجود نیز از همین قرارداد پیروی می‌کنند. u, v و ω بیانگر سرعت محوری، سرعت شعاعی و سرعت مماسی می‌باشند.

در شکل ۴ نتایج میدان سرعت مورد N29S054 با ۴ نوع شبکه متفاوت با نتایج آزمایشگاهی و نتایج شبیه‌سازی گردابه بزرگ پیشین مقایسه شده است. وجود جسم جداکننده موجب ایجاد جریان بازگشتی در فاصله محوری ۶/۸ میلی‌متری و ۲۰ میلی‌متری می‌شود و نتایج با نتایج آزمایشگاهی تطابق دارد. در فاصله محوری ۴۰ میلی‌متری در پروفیل سرعت محوری می‌توان حضور شکست گردابه‌ای را مشاهده کرد. در فاصله محوری ۱۲۵ میلی‌متری یک اختلاف بین داده‌های آزمایشگاهی و نتایج شبیه‌سازی مشاهده می‌شود. علت آن هم عدم برقراری معادله بقای جرم توسط سرعت شعاعی است.



شکل ۵- مقایسه پروفیل‌های سرعت محوری، شعاعی و مماسی مورد N29S054 با مقادیر آزمایشگاهی ال عبدلی و همکاران [۳۲] (مربع) و نتایج شبیه‌سازی مالالاسکارا و همکاران [۳۳] (دایره). خطوط آبی، سیاه، سبز و قرمز به‌ترتیب بیانگر نتایج شبکه‌های G1, G2, G3 و G4 می‌باشند.

Figure 5- Comparison of axial, radial, and swirl velocity profiles' of N29S054 with experimental data of Al-Abdeli and Masri (squares) and LES simulation results of Malalasekera et al. (circles). Blue, black, green and red lines indicates G1, G2, G3 and G4 grid results, respectively..

تمامی شبکه‌های محاسباتی تطابق مناسبی با نتایج آزمایشگاهی و نتایج شبیه‌سازی پیشین را دارند. عدد رینولدز جریان سوخت در مورد متان و هوا کمتر از مقدار عدد رینولدز سوخت در مورد N29S054 است. همچنین عدد رینولدز جریان هوای تونل باد در مسئله جریان متان و هوای موردنظر برابر با عدد رینولدز جریان هوای تونل باد در مورد غیراحتراقی N29S054 است. عدد رینولدز جریان هوای پیچشی در مورد جریان متان و هوا کمی بیشتر از مورد غیراحتراقی N29S054 است. با این اوصاف به دلیل اختلاف بسیار کم در عدد رینولدز جریان سوخت، از شبکه G2 با $2/7$ میلیون مش (که دارای سلول بیشتر در راستای محوری و شعاعی نسبت به شبکه G1 است) استفاده می‌شود.

اعتبارسنجی حل عددی

در این قسمت در ابتدا مدل‌های آشفتگی $k-\epsilon$ و $k-\omega$ SST-SAS با انجام شبیه‌سازی مورد SM1 مشعل پیچشی سیدنی با هندسه دو بعدی اعتبارسنجی می‌شوند. سپس جریان غیر احتراقی متان و هوا با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه بزرگ شبیه‌سازی می‌شود. هدف از شبیه‌سازی جریان غیراحتراقی بررسی ناتوانی مدل‌های آشفتگی میانگین‌گیری رینولدز در نمایش نواحی بازگردشی موجود در فیزیک شعله و همچنین بررسی اثر افزایش دما و احتراق بر میدان جریان سوخت و اکسیدایزر است. قابل ذکر است که u ، v و ω بیانگر سرعت محوری، سرعت شعاعی و سرعت مماسی می‌باشند.

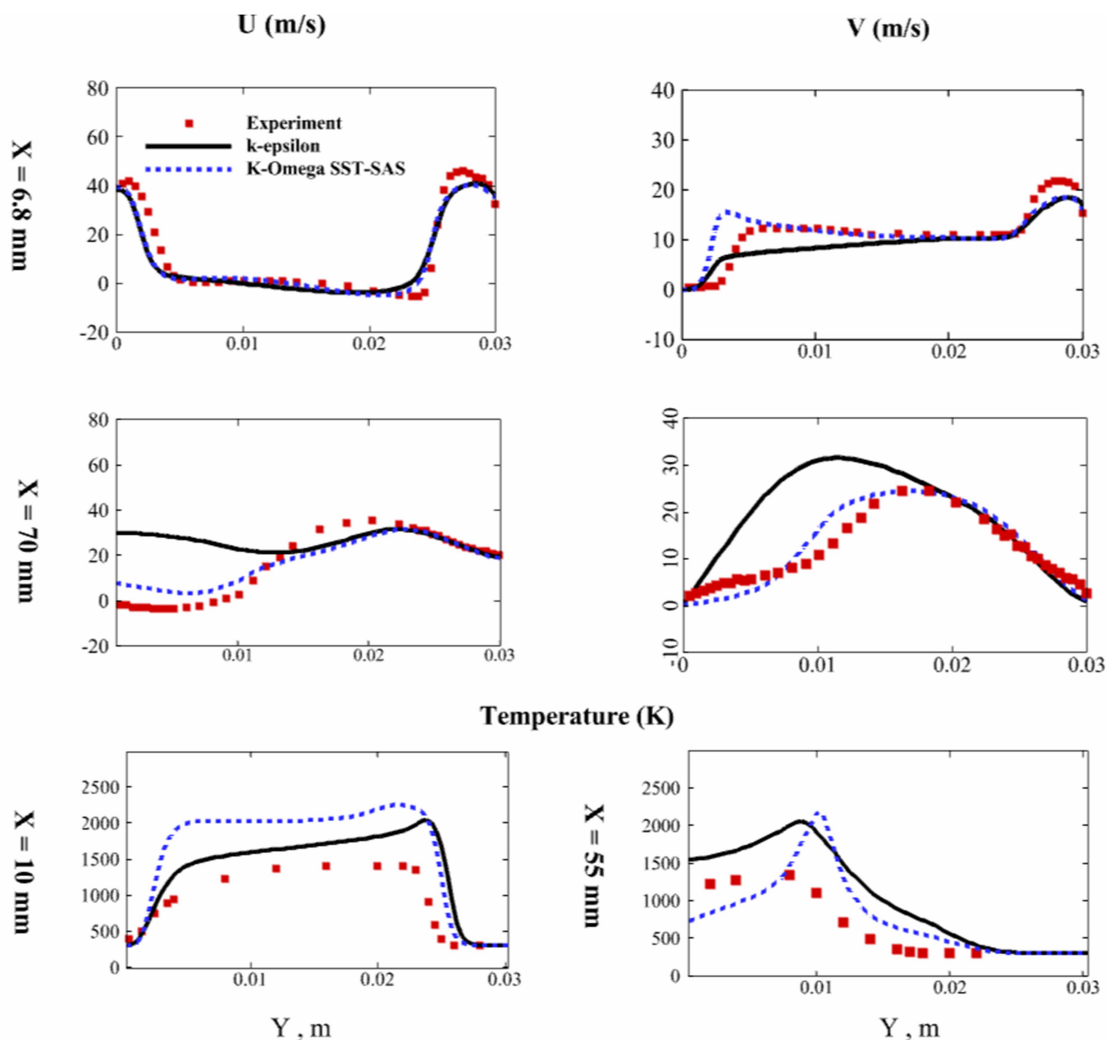
در شکل ۶، نتایج حاصل از شبیه‌سازی عددی احتراق متان و هوا در مورد SM1 مشعل پیچشی سیدنی نمایش داده شده است. در این میان، نتایج نشان می‌دهد که ناحیه بازگردشی اولیه ناشی از جسم جداکننده در هر دو مدل آشفتگی مذکور به خوبی نمایش داده شده است. کالت و همکاران [۲۷] بیان می‌کنند که در این نوع شعله‌ها یک ناحیه بازگردشی ثانویه با شعاع ۱۰ میلی‌متر در فاصله محوری بین ۶۵ تا ۱۱۰ میلی‌متر در پایین دست پدید می‌آید. اما نتایج حاضر نشان می‌دهند که هر دو مدل آشفتگی در نمایش ناحیه بازگردشی ناشی از چرخش پایین دست ناتوانند. علت این ناتوانی را کشیر و همکاران [۱۶] در ضعف مدل‌های میانگین‌گیری رینولدز در شبیه‌سازی جریانات برشی می‌دانند. همان‌طور که در نتایج مشاهده می‌شود، در فاصله محوری ۷۰ میلی‌متر (حضور ناحیه بازگردشی ثانویه) هر دو مدل از مرکز جت سوخت تا شعاع $0/01$ متری (شعاع ناحیه بازگردشی ۱۰ میلی‌متر است) ناتوان در شبیه‌سازی درست مقدار سرعت محوری است. به عبارت دیگر، وجود سرعت منفی یا صفر محوری در این فاصله شعاعی حاکی از وجود ناحیه سکون و بازگردشی است. در این مورد نتایج مدل $k-\omega$ SST-SAS بهتر از مدل دیگر است. با توجه به شکل ۶، علت خطای موجود در مقدار دمای پیش‌بینی‌شده توسط مدل $k-\omega$ SST-SAS به خصوص در مقدار بیشینه دما، ضعف در محاسبه درست مقدار کسر واکنشی K است که این امر، بیشینه دمای محاسبه‌شده را تحت تأثیر قرار می‌دهد. به‌طور کلی، مدل $k-\omega$ SST-SAS دارای مقدار و روند مناسب‌تری است و می‌توان از این مدل در مسائل احتراقی نیز استفاده کرد. با توجه به نیاز استفاده مقایسه‌ای میان مقادیر مختلف هیدروژن، این مدل انتخاب می‌شود.

در شکل ۷ نتایج شبیه‌سازی جریان غیراحتراقی به کمک روش شبیه‌سازی گردابه بزرگ به همراه نتایج آزمایشگاهی شعله پیچشی سیدنی مورد SM1 و همچنین نتایج شبیه‌سازی جریان احتراقی شعله SM1 نمایش داده شده است.

در نمودارهای رسم شده در شکل‌های ۷ می‌توان مشاهده کرد که مقدار سرعت محوری جریان غیرواکنشی بر روی محور اصلی نازل هم در بالا و هم در پایین دست از مقدار تجربی و واکنشی کمتر است. می‌توان با بررسی فیزیک پدیده احتراق دریافت که با شروع احتراق و افزایش دما در شرایط فرض عدد ماخ پایین در جرم ثابت، چگالی کاهش و در نتیجه سرعت جریان افزایش می‌یابد. به همین دلیل علاوه بر مقدار سرعت محوری، سرعت شعاعی نیز از حالت واکنشی پایین‌تر است.

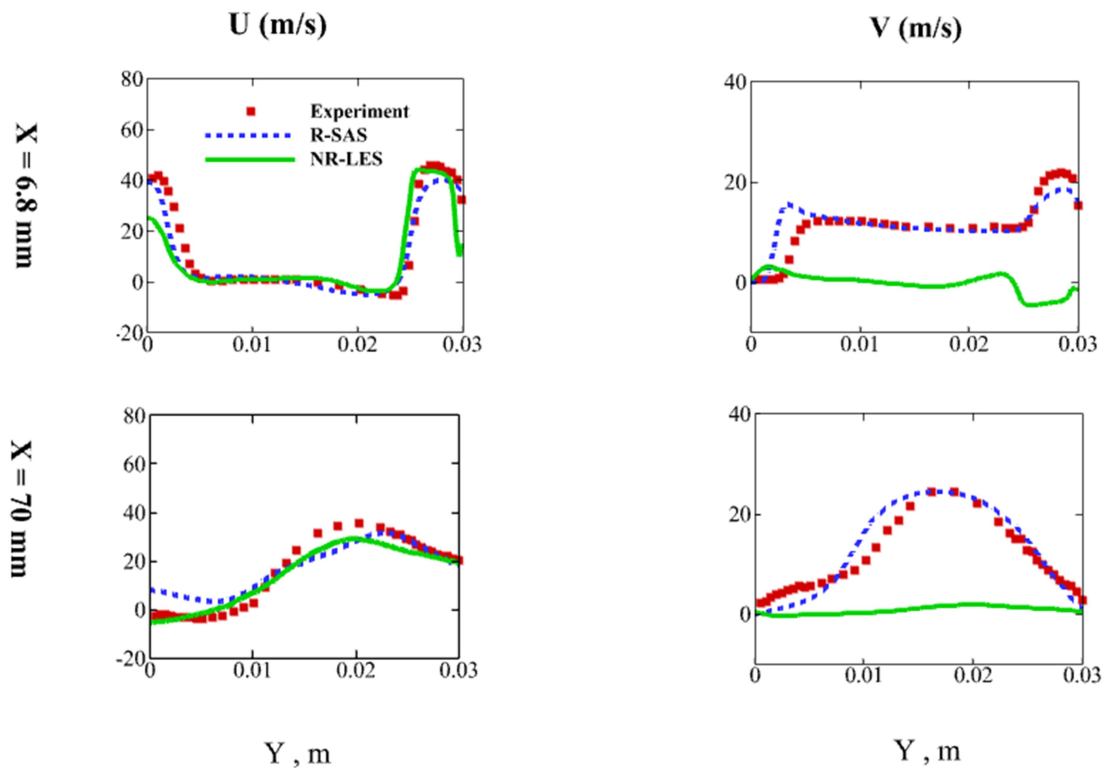
در شکل ۸ نیز کانتورهای سرعت محوری جریان غیراحتراقی متان و هوا و همچنین جریان احتراقی شعله SM1 مشعل پیچشی سیدنی نمایش داده شده است. همان‌طور که در شکل ۸ مشاهده می‌شود، با استفاده از رهیافت شبیه‌سازی گردابه

بزرگ و همچنین حالت غیرواکنشی آن، نواحی بازگردشی اولیه و ثانویه در بالای جسم جداکننده و همچنین در فاصله محوری ۵۰ تا ۱۲۰ میلی متری برخلاف کانتور جریان احتراقی شبیه سازی شده با مدل های میانگین گیری رینولدز مشاهده می شود. به عبارت دیگر، با استفاده از این روش و حل شدن تمامی نوسانات سرعت، خصوصیات ناپایای جریان مانند ناحیه بازگردشی ثانویه قابل مشاهده خواهد بود.



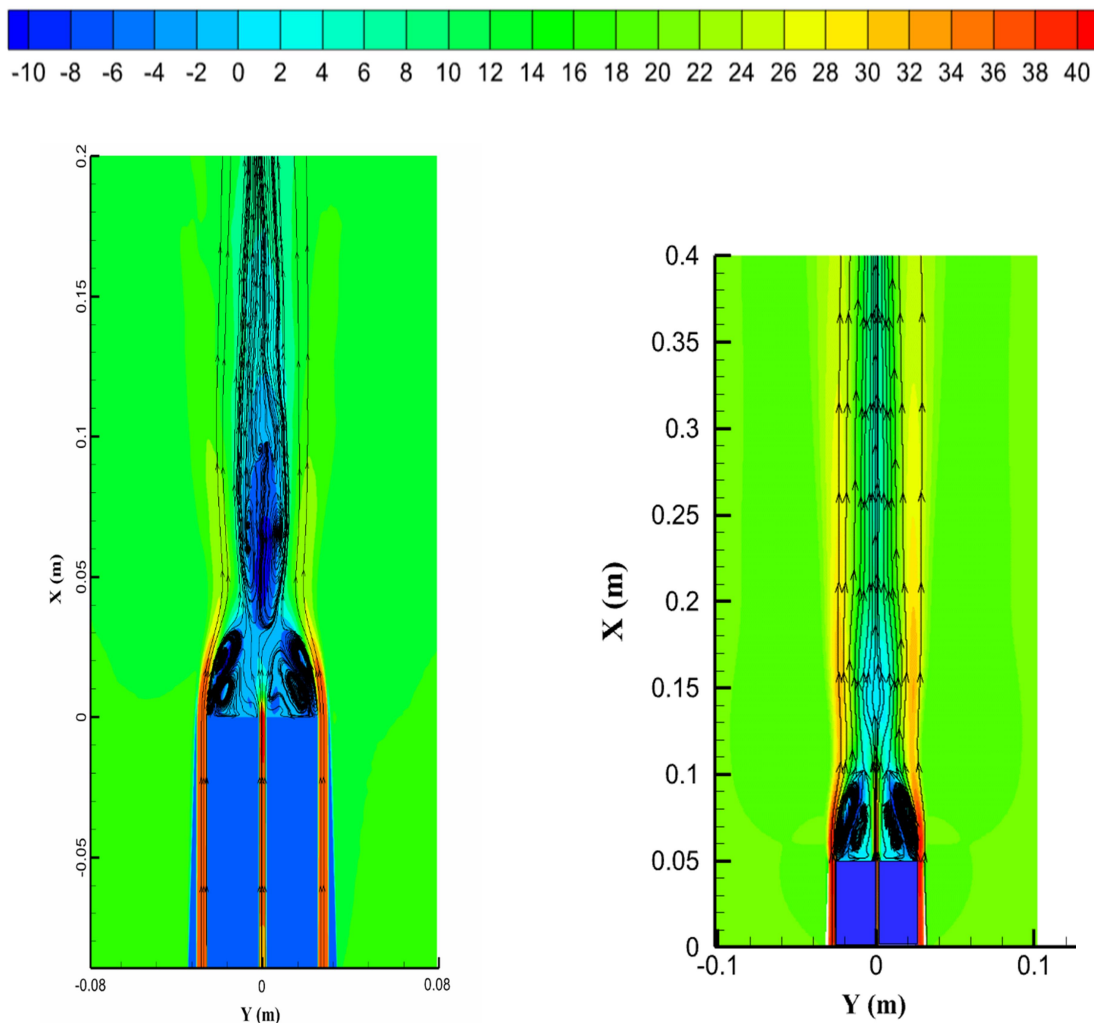
شکل ۶- مقایسه توزیع سرعت محوری و دما در راستای شعاعی با نتایج تجربی در موقعیت های محوری متفاوت.

Figure 6- Comparison of axial velocity distribution and temperature with experimental data along the radial distance at different axial locations.



شکل ۷- مقایسه توزیع سرعت محوری و شعاعی جریان احتراقی با روش میانگین‌گیری رینولدز (خط چین آبی)، مقادیر آزمایشگاهی جریان احتراقی مورد SM1 (مربع قرمز) و جریان غیر احتراقی با روش شبیه‌سازی گردابه بزرگ (خط سبز) در راستای شعاعی با نتایج تجربی در موقعیت‌های محوری متفاوت.

Figure 7- Comparison of axial and radial velocity distribution of reacting flow with Reynolds averaging method (blue dashed line), experimental values of combustion flow for SM1 case (red square) and non-reacting flow with large vortex simulation method (green line) in the radial direction at different axial locations.



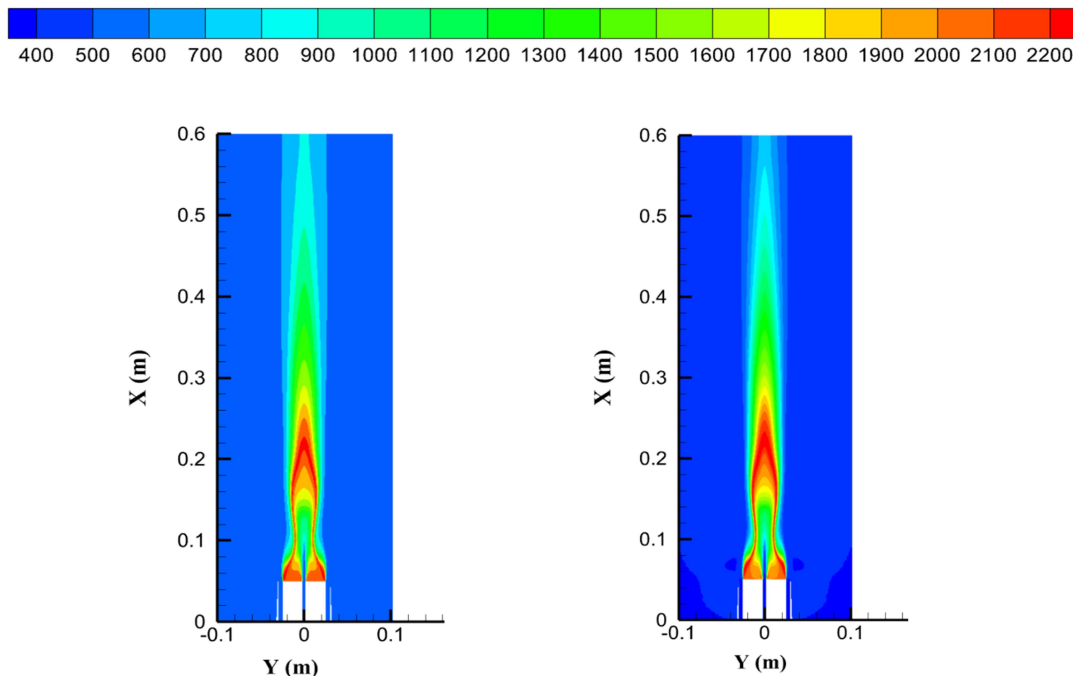
شکل ۸- کانتور سرعت محوری و خطوط جریان نشان‌دهنده دو ناحیه بازگردشی اولیه و ثانویه در جریان غیراحتراقی متان و هوا به کمک روش شبیه‌سازی گردابه بزرگ (شکل سمت چپ). کانتور سرعت محوری و خطوط جریان در جریان احتراقی متان و هوا به کمک روش میانگین‌گیری رینولدز (سمت راست)

Figure 8- Axial velocity contour and flow streamlines showing the primary and secondary recirculation zones in the non-reacting flow of methane and air with LES (left). Axial velocity contour and flow streamlines showing only primary recirculation zone in the reacting flow with RANS (right).

نتایج

در این بخش شبیه‌سازی شعله SM1 مشعل پیچشی سیدنی با استفاده از مدل آشفتگی $k-\omega$ SST-SAS با ترکیب ۴ نوع درصد حجمی هیدروژن متفاوت به متان انجام شده است. در شکل ۹ کانتور دما برای دو حالت شعله متان و هوا بدون هیدروژن و شعله متان به همراه ۲۰ درصد هیدروژن و هوا ترسیم شده است. از این شکل می‌توان دریافت که در فاصله ۹۰ میلی‌متر تا ۱۹۰ میلی‌متر از سطح خروجی نازل سوخت، شعله با ۲۰ درصد هیدروژن دارای نواحی با دمای بالاتر در سطح خود است. همچنین بر روی سطح جسم جداکننده در شعله همراه با هیدروژن نسبت به شعله بدون هیدروژن، نواحی با دمای بالاتر بدلیل کمتر بودن مقیاس زمانی نفوذ هیدروژن از محور نازل دور شده‌اند و اندکی کاهش دما مشاهده می‌شود.

همچنین انتظار می‌رود بدلیل نفوذ راحت‌تر هیدروژن نسبت به متان، با افزودن هیدروژن طول شعله کاهش یابد [۱۶]. با فرض اینکه نواحی دما بالا سطح شعله محسوب شود [۳۲].
 با افزودن هیدروژن به شعله، سطح شعله اندکی افزایش ارتفاع نسبت به سطح خروجی نازل دارد. علت آن هم ضعف مدل آشفته‌گی میانگین‌گیری رینولدز در محاسبه و نمایش ناحیه بازگردشی ثانویه است. به عبارتی جریان الگوی جت خود را حفظ کرده است و در راستای محور اصلی نازل به دلیل حضور هیدروژن، شعله افزایش ارتفاع دارد.



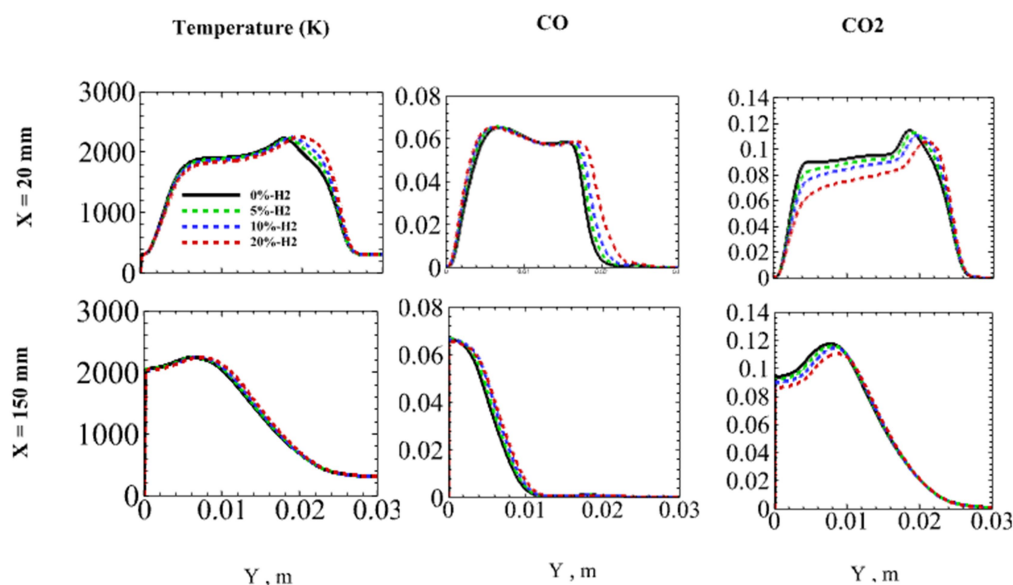
شکل ۹- کانتور دما جریان متان و هوا (سمت چپ). کانتور دما جریان ۸۰ درصد حجمی متان-۲۰ درصد حجمی هیدروژن و هوا (سمت راست)

Figure 9- Temperature contour of methane and air flow (left side). Temperature contour of methane-20% hydrogen and air flow (right side)

در شکل ۱۰، اثر افزودن ۵، ۱۰ و ۲۰ درصد حجمی هیدروژن به متان بر روی کسر جرمی کربن مونواکسید، کربن دی‌اکسید و دما از نتایج عددی استخراج و نشان داده شده است. در فاصله $x = 20 \text{ mm}$ با افزودن هیدروژن، مقدار اندکی افزایش دما در قسمت پیشینه دما مشاهده می‌شود. علت آن هم وجود ناحیه بازگردشی اولیه در این ناحیه است. هیدروژن نیز بدلیل چگالی انرژی بالای خود، در این ناحیه موجب افزایش دما می‌شود. براساس مقاله کشیر و همکاران [۱۶] جهت بررسی و مشاهده دقیق اثر هیدروژن بایستی تا درصدهای ۹۰ درصد حجمی نیز به سوخت متان اضافه کرد. اما در اینجا هدف بررسی اثر افزودن پله‌ای هیدروژن به سوخت است. در فاصله $x = 150 \text{ mm}$ به دلیل کم بودن مقدار هیدروژن افزوده شده به سوخت و همچنین حفظ الگوی جت، میزان تغییرات دما محسوس ناست و تنها مقدار خیلی کمی افزایش در مقدار پیشینه دما داریم. همچنین در هر دو نمودار دما، نمودار اندکی بدلیل حضور هیدروژن در سوخت، از محور اصلی نازل دور شده است. همچنین کاهش دما بر روی سطح جسم جداکننده و انتقال پیشینه دما به طرفین، موجب کاهش دما از فاصله محور اصلی نازل تا نقطه پیشینه دما شده است.

افزودن هیدروژن به سوخت بر روی گونه‌های میانی مانند OH اثر می‌گذارد. بررسی‌های انجام شده در این بخش بر روی مقدار کربن منواکسید و کربن دی‌اکسید با احتساب تغییر مقادیر گونه‌های میانی متأثر است. با افزودن هیدروژن میزان کربن دی‌اکسید حاصل از احتراق با دما و مقدار گونه‌های میانی در ارتباط است [۳۴]. اما در اینجا میبینیم که روندی مشابه روند نمودار دما را داراست. می‌توان دریافت با افزودن هیدروژن و کاهش میزان سوخت هیدروکربنی، مقدار کربن دی‌اکسید کاهش یافته است.

همچنین بر اساس نمودارهای کربن منواکسید می‌توان دریافت با افزایش درصد هیدروژن در هر دو فاصله ۲۰ و ۱۵۰ میلی‌متری، مقدار کربن منواکسید اندکی افزایش یافته است. در مقطع $x = 150 \text{ mm}$ می‌توان دریافت با افزودن هیدروژن و کاهش دما در حد فاصل ۰ تا ۰/۰۱ متر در راستای شعاعی، مقدار کربن منواکسید به دلیل کامل نشدن احتراق افزایش یافته است. نتیجتاً به دلیل ناقص بودن احتراق مقدار کربن دی‌اکسید در این فاصله شعاعی کاهش می‌یابد. در فاصله شعاعی ۰ تا ۰/۰۲ متر در فاصله محوری $x = 20 \text{ mm}$ نیز همین ارتباط برقرار است. فاصله شعاعی ۰/۰۱ به بعد در مقطع $x = 150 \text{ mm}$ دلیل کم بودن تغییرات مورد بررسی قرار نمی‌گیرد. با افزودن ۲۰ درصد حجمی هیدروژن در فاصله شعاعی ۰/۰۲ متر به بعد به دلیل حضور جریان بازگردشی و افزایش مقدار بیشینه دما، افزایش دی‌اکسید کربن و افزایش منواکسید کربن مشاهده می‌شود. به عبارتی با افزودن هیدروژن میزان اکسیداسیون کربن منواکسید به کربن دی‌اکسید افزایش یافته است.



شکل ۱۰- اثر افزودن هیدروژن به متان بر پروفیل توزیع دما، گونه کربن منواکسید و کربن دی‌اکسید برای مقاطع محوری مختلف بر حسب فاصله شعاعی. خط بیانگر جریان بدون هیدروژن و خط چین جریان با هیدروژن است.

Figure 10- The effect of adding hydrogen to methane on the distribution profile of temperature, carbon monoxide and carbon dioxide species for different axial sections according to the radial distance. The line represents the flow without hydrogen and the dashed line represents the flow with hydrogen

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، اثر افزودن هیدروژن به متان در شعله سیدنی (SM1)، شبیه‌سازی عددی جریان واکنشی و غیرواکنشی با نرم‌افزار OpenFOAM انجام شد. بدین منظور، از مدل‌های آشفتگی $k-\varepsilon$ و $k-\omega$ SST-SAS برای جریان و مدل تابش P1 و واکنشگاه اختلاط جزئی برای مدل‌سازی احتراق استفاده شد. مقایسه نتایج با مقدار تجربی نشان می‌دهد که توانمندی مدل $k-$

SST-SAS ω در محاسبه تانسور تنش برشی باعث می‌شود تا نتایج عددی حاصل از شبیه‌سازی میدان جریان و دما با استفاده از این مدل تطابق بهتری با نتایج تجربی در مقایسه با مدل $k-\epsilon$ داشته باشد. علاوه بر این، مقایسه‌ای میان میدان سرعت جریان واکنشی و غیرواکنشی با استفاده از رهیافت شبیه‌سازی گردابه بزرگ صورت گرفت. همچنین جهت بررسی اثر شبکه بر نتایج، کیس غیر احتراقی N29S054 در ۴ نوع شبکه حل و با نتایج آزمایشگاهی و نتایج پیشین مقایسه شد. در این مقایسه، با بررسی نتایج به‌دست آمده از حل عددی جریان غیرواکنشی متان و هوا مشاهده می‌شود که پیش‌بینی شکست گردابه‌ای (که به‌شدت به نوسانات زمانی جریان وابسته است)، برخلاف مدل‌های میانگین‌گیری رینولدز با رهیافت شبیه‌سازی گردابه بزرگ امکان‌پذیر است. همچنین با فعال‌شدن فرآیند احتراق در جریان متان-هوا، مقادیر سرعت‌های شعاعی و محوری افزایش قابل‌توجهی می‌یابند.

در گام بعدی اثرات افزودن هیدروژن به سوخت متان مورد بررسی قرار گرفت. نتایج شبیه‌سازی احتراق متان با هیدروژن به میزان ۵، ۱۰ و ۲۰ درصد حجمی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که با اختلاط متان و هیدروژن، مقدار بیشینه دما افزایش یافته که مطابق پژوهش‌های قبلی است. با افزودن هیدروژن نواحی دما بالا بر روی جسم جداکننده نسبت به محور اصلی نازل دور می‌شوند. همچنین مقداری نواحی دما بالای سطح شعله افزایش می‌یابد. با افزودن هیدروژن به دلیل ضعف مدل‌های میانگین‌گیری رینولدز و عدم محاسبه ناحیه بازگردشی ثانویه نواحی با دمای بالا اندکی افزایش ارتفاع دارد. علت کاهش آلاینده کربن دی‌اکسید در بالادست جریان، کمتر شدن مقدار سوخت هیدروکربنی با افزایش تزریق هیدروژن به متان و در پایین‌دست با توجه به ضعف مدل‌های میانگین‌گیری رینولدز در ناحیه بازگردشی ثانویه، کامل نبودن احتراق است. همچنین به دلیل سرعت بالای اختلاط هیدروژن، مقدار بیشینه دما در نقاط بالادست و پایین دست در فواصل شعاعی مختلف، از خروجی سوخت دور می‌شود. همچنین در نقاط بالادست با افزایش گونه کربن منواکسید و کامل بودن احتراق بدلیل حضور ناحیه بازگردشی اولیه، گونه کربن دی‌اکسید کاهش می‌یابد. اما در نقاط پایین‌دست بدلیل کامل نبودن احتراق با افزایش کربن منواکسید، مقدار کربن دی‌اکسید تغییر چشم‌گیری ندارد.

منابع

- [1] K. Minakawa, T. Miyajima, S. Yuasa, K. Minakawa, T. Miyajima, and S. Yuasa, "Development of a hydrogen-fueled micro gas turbine with a lean premixed combustor," in *33rd Joint Propulsion Conference and Exhibit*, 1997, p. 3388.
- [2] F. Cozzi and A. Coghe, "Behavior of hydrogen-enriched non-premixed swirled natural gas flames," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 31, no. 6, pp. 669-677, 2006.
- [3] P. Rajpara, R. Shah, and J. Banerjee, "Effect of hydrogen addition on combustion and emission characteristics of methane fuelled upward swirl can combustor," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 43, no. 36, pp. 17505-17519, 2018.
- [4] M. Emadi, D. Karkow, T. Salameh, A. Gohil, and A. Ratner, "Flame structure changes resulting from hydrogen-enrichment and pressurization for low-swirl premixed methane-air flames," *international journal of hydrogen energy*, vol. 37, no. 13, pp. 10397-10404, 2012.
- [5] R. Schefer, "Reduced Turbine Emissions Using Hydrogen-Enriched Fuels " *Hydrogen, Fuel Cells, and Infrastructure Technologies*, 2003.
- [6] H. J. Burbano, A. A. Amell, and J. M. García, "Effects of hydrogen addition to methane on the flame structure and CO emissions in atmospheric burners," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 33, no. 13, pp. 3410-3415, 2008.
- [7] S. Meziane and A. Bentebiche, "Numerical study of blended fuel natural gas-hydrogen combustion in rich/quench/lean combustor of a micro gas turbine," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 44, no. 29, pp. 15610-15621, 2019.
- [8] L. Xiang, H. Jiang, F. Ren, H. Chu, and P. Wang, "Numerical study of the physical and chemical effects of hydrogen addition on laminar premixed combustion characteristics of methane and ethane," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 45, no. 39, pp. 20501-20514, 2020.
- [9] F. Ren, H. Chu, L. Xiang, W. Han, and M. Gu, "Effect of hydrogen addition on the laminar premixed combustion characteristics the main components of natural gas," *Journal of the Energy Institute*, vol. 92, no. 4, pp. 1178-1190, 2019.
- [10] M. K. Büyükkakın and S. Öztuna, "Numerical investigation on hydrogen-enriched methane combustion in a domestic back-pressure boiler and non-premixed burner system from flame structure and pollutants aspect," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 45, no. 60, pp. 35246-35256, 2020.

- [11] J. Fu *et al.*, "Effects of hydrogen addition on combustion, thermodynamics and emission performance of high compression ratio liquid methane gas engine," *Fuel*, vol. 283, p. 119348, 2021.
- [12] Z. Wei, H. Zhen, J. Fu, C. Leung, C. Cheung, and Z. Huang, "Experimental and numerical study on the laminar burning velocity of hydrogen enriched biogas mixture," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 44, no. 39, pp. 22240-22249, 2019.
- [13] S. Öztuna and M. K. Büyükakın, "Effects of hydrogen enrichment of methane on diffusion flame structure and emissions in a back-pressure combustion chamber," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 45, no. 10, pp. 5971-5986, 2020.
- [14] O. Stein and A. Kempf, "LES of the Sydney swirl flame series: A study of vortex breakdown in isothermal and reacting flows," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 31, no. 2, pp. 1755-1763, 2007.
- [15] A. Kempf, W. Malalasekera, K. Ranga-Dinesh, and O. Stein, "Large eddy simulations of swirling non-premixed flames with flamelet models: a comparison of numerical methods," *Flow, turbulence and combustion*, vol. 81, pp. 523-561, 2008.
- [16] 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. 40, no. 18, pp. 6243-6258, 2015.
- [17] T. Poinso and D. Veynante, *Theoretical and numerical combustion*. RT Edwards, Inc., 2005.
- [18] F. chitgarha, "Simulation of Partially Premixed Considering Differential Diffusion in 2D Flamelet Combustion Model," 1398. In Persian
- [19] D. Galley, S. Ducruix, F. Lacas, and D. Veynante, "Mixing and stabilization study of a partially premixed swirling flame using laser induced fluorescence," *Combustion and Flame*, vol. 158, no. 1, pp. 155-171, 2011.
- [20] M. W. Chase, "NIST-JANAF thermochemical tables for oxygen fluorides," *Journal of physical and chemical reference data*, vol. 25, no. 2, pp. 551-603, 1996.
- [21] J. Chomiak, "Combustion a study in theory, fact and application," 1990.
- [22] P. N. Nordin, *Complex chemistry modeling of diesel spray combustion*. Chalmers University of Technology Sweden, 2001.
- [23] Z. Li, M. Ferrarotti, A. Cuoci, and A. Parente, "Finite-rate chemistry modelling of non-conventional combustion regimes using a Partially-Stirred Reactor closure: Combustion model formulation and implementation details," *Applied energy*, vol. 225, pp. 637-655, 2018.
- [24] F. Menter, "Zonal two equation kw turbulence models for aerodynamic flows," in *23rd fluid dynamics, plasmadynamics, and lasers conference*, 1993, p. 2906.
- [25] M. Salehi, "Assessment of the progress variable variance modelling on large-eddy simulation of turbulent premixed flames using flamelet-generated manifold model," *Fuel And Combustion*, 1400. In Persian
- [26] H. Pitsch, "Large-eddy simulation of turbulent combustion," *Annu. Rev. Fluid Mech.*, vol. 38, pp. 453-482, 2006.
- [27] D. M. G. Gregory P. Smith, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr., Vitali V. Lissianski, and Zhiwei Qin. "http://www.me.berkeley.edu/gri_mech." (accessed).
- [28] P. A. Kalt, Y. M. Al-Abdell, A. R. Masri, and R. S. Barlow, "Swirling turbulent non-premixed flames of methane: flow field and compositional structure," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, no. 2, pp. 1913-1919, 2002.
- [29] Y. Yang and S. K. Kær, "Large-eddy simulations of the non-reactive flow in the Sydney swirl burner," *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 36, pp. 47-57, 2012.
- [30] X. Wu, K. D. Squires, and T. S. Lund, "Large eddy simulation of a spatially-developing boundary layer," in *Proceedings of the 1995 ACM/IEEE conference on Supercomputing*, 1995, pp. 67-es.
- [31] S. Zhong, F. Zhang, Q. Du, and Z. Peng, "Characteristics of reactivity controlled combustion with n-heptane low temperature reforming products," *Fuel*, vol. 275, p. 117980, 2020.
- [32] Y. M. Al-Abdeli and A. R. Masri, "Recirculation and flowfield regimes of unconfined non-reacting swirling flows," *Experimental thermal and fluid science*, vol. 27, no. 5, pp. 655-665, 2003.
- [33] W. Malalasekera, K. Ranga Dinesh, S. Ibrahim, and M. Kirkpatrick, "Large eddy simulation of isothermal turbulent swirling jets," *Combustion Science and Technology*, vol. 179, no. 8, pp. 1481-1525, 2007.
- [34] A. A. Hosseini, M. Ghodrati, M. Moghiman, and S. H. Pourhoseini, "Numerical study of inlet air swirl intensity effect of a Methane-Air Diffusion Flame on its combustion characteristics," *Case Studies in Thermal Engineering*, vol. 18, p. 100610, 2020.

English Abstract

Study of hydrogen-methane flame structure in Sydney swirl stabilized burner using volumetric combustion model

Arman Hasanabadi¹, Shidvash Vakili^{2*}, Rasoul Rahmati³

1- School of Aerospace Engineering, College of Interdisciplinary Science and Technology, University of Tehran, Tehran, Iran, arman.hasanabadi@ut.ac.ir

2- School of Aerospace Engineering, College of Interdisciplinary Science and Technology, University of Tehran, Tehran, Iran, vakili@ut.ac.ir

3- School of Aerospace Engineering, College of Interdisciplinary Science and Technology, University of Tehran, Tehran, Iran, rasoul.rahmati@ut.ac.ir

*Corresponding author

(Received: 2024/04/06, Received in revised form: 2024/08/05, Accepted: 2024/08/07)

In industrial applications, pollutants from the combustion of fossil fuels in gas turbines of power plants are being emitted, and therefore, the investigation of their emissions, especially in non-premixed flames, is of great importance. In this research, the effect of adding hydrogen to methane in a non-premixed methane-air flame is investigated using numerical simulation in OpenFOAM software. For this purpose, the combustion of methane-air in the Sydney swirl burner (SM1) is modeled using $k-\epsilon$ and $k-\omega$ SST-SAS turbulence models, P1 radiation model, and Partially Stirred Reactor (PaSR) volumetric combustion model. In this regard, the effect of hydrogen volumetric flow rate and the resulting temperature increase on the flame structure and combustion species is investigated. Also, the pattern of the secondary recirculation zone is shown in the non-reacting methane-air flow using the Large Eddy Simulation (LES) modeling. By adding hydrogen at the upstream, the high-temperature regions move away from the nozzle axis due to the rapid penetration of hydrogen. Also, with the addition of hydrogen, the lack of calculation of the secondary recirculation zone by the Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) models, the high-temperature regions slightly increase in height. The reason for the reduction of carbon dioxide in the upstream is the decrease in the amount of hydrocarbon fuel and the incomplete combustion in the downstream and the increase in carbon monoxide.

Keywords: Non-premixed Flame, Sydney Swirl-Stabilized Burner, PaSR Model, OpenFOAM, Hydrogen Combustion