

مطالعه عددی اثر دینامیک جریان و اکسیژن بر احتراق متان-هیدروژن در شرایط Mild

امیر مردانی* و صادق تابع جماعت**

دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی هوافضا

(دریافت: ۱۳۸۸/۱۰/۱۰، پذیرش: ۱۳۸۸/۱۲/۲۵)

احتراق تحت شرایط رقیق‌سازی زیاد و دمای پیش‌گرم بالا (Mild) دارای ویژگی‌هایی است که آن را از سایر سیستم‌های احتراقی متمایز می‌کند. از جمله آن‌ها، کاهش چشمگیر اکسیژن در منطقه واکنش در مقایسه با احتراق عادی و در نتیجه کم سرعت بودن واکنش‌ها و به عبارت دیگر آرام‌سوزی است. این امر موجب می‌شود که مقیاس زمانی جریان و انجام واکنش‌ها به یکدیگر نزدیک شود. برای مطالعه این شرایط (Regime) احتراقی شعله متقارن محوری مخلوط CH_4+H_2 آزمایش‌های گروه دالی که شرایط احتراق Mild را دارد، مبنای مدلسازی قرار گرفته است [Proc. Combust. Inst. 29 (2002), 1147-1154]. در مدلسازی انجام شده از معادلات RANS و مدل توربولانسی $k-\epsilon$ اصلاح شده به همراه مدل EDC برای ایجاد رابطه مناسب بین سینتیک شیمیایی و آشفستگی جریان و همچنین از سازوکارهای شیمیایی کامل GRI2.11 و کاهش یافته DRM-22 استفاده شده است. با تغییر غلظت اکسیژن هوای داغ ورودی و سرعت فواره سوخت، ویژگی‌های این شرایط احتراقی نظیر اهمیت قدرت نفوذ مولکولی در میدان و سرعت واکنش‌ها و توزیع متغیرهای میدان بررسی شد. دیده شد که در چنین شرایطی پدیده انتقال مولکولی که در جریان‌های آشفته متعارف معمولاً قابل صرف‌نظر کردن است، دارای اهمیت خواهد شد. همچنین نتایج حاکی از آن است که با دور شدن از دهانه نازل، سرعت و شدت واکنش‌ها افزایش یافته و ضمن دور شدن از شرایط احتراق Mild از دقت مدلسازی کاسته می‌شود. همچنین در نزدیکی دهانه نازل و غلظت‌های اکسیژن کم و رینولدزهای پایین اثرگذاری انتقال مولکولی قابل توجه است و نباید از آن صرف‌نظر شود. مقایسه نتایج مدلسازی و تجربی حاکی از رضایت‌بخش بودن دقت نتایج عددی دارد.

واژگان کلیدی: احتراق Mild، رقیق‌سازی، آشفستگی، متان، هیدروژن

مقدمه

تأمین و تولید انرژی همواره یکی از دغدغه‌های اصلی بشر بوده است. امروزه محدودیت منابع سوخت فسیلی و مباحث زیست‌محیطی، محققان را به سمت راهکارهای بهینه‌تر تولید انرژی و سایر منابع تولید انرژی سوق داده است. یکی از راهکارهای تولید انرژی که مزایای صرفه‌جویی در مصرف سوخت و کاهش تولید آلاینده‌ها را نیز به دنبال دارد، احتراق تحت شرایط پیش‌گرم اکسیدکننده تا دمای بالا و رقیق‌سازی هوا جهت کاهش درصد O_2 موجود در منطقه واکنش است. اساس این شرایط احتراقی به نظریه وینبرگ تحت عنوان "احتراق با آنتالپی اضافه"^[۱] که در سال ۱۹۷۱ مطرح شد، برمی‌گردد [۱]. امروزه این نوع احتراق تحت عناوین مختلفی نظیر [۲ و ۳] $HiTAC^3$ ، $HiCOT^3$ ، $Mild^4$ و $Flameless^4$ شناخته می‌شود.

محققان متعددی در طی ۱۵ سال گذشته به مطالعه تجربی و عددی این شرایط (Regime) احتراقی پرداخته‌اند. برخی از مطالعات تجربی بدین شرح است؛ گوپتا و همکارانش در سال ۱۹۹۷ به مطالعه اثر ویژگی‌های سوخت در احتراق با هوای دما بالا پرداخته و تاثیر بسیار بالای ویژگی‌های سوخت در مشخصات احتراقی شرایط $HiTAC$ را گزارش کرده‌اند [۵]. همچنین در

* دانشجوی دکتری - نویسنده مخاطب (ایمیل: Amir_mardani@aut.ac.ir)

** دانشیار (ایمیل: Sadegh@aut.ac.ir)

^۱ Large excess enthalpy combustion

^۲ High Temperature Air Combustion

^۳ High Temperature Combustion Technology

^۴ Moderate or intense low-oxygen dilution

مقاله سال ۲۰۰۰ نتایج مطالعه ویژگی‌ها و مشکلات احتراق HiTAC را ارائه نموده و نشان دادند که ویژگی‌های گرمایی و سینتیکی شعله HiTAC به ویژگی‌های سوخت، دمای پیش‌گرم و غلظت اکسیژن وابسته است [۶]. طول شعله و تأخیر در زمان جرقه برای سوخت استیلن موضوع مورد بررسی ایشان در سال ۲۰۰۲ [۷] است. مشخصات گرمایی سوخت‌های گازی و بررسی آلاینده‌گی در احتراق HiTAC نیز در سال ۲۰۰۴ [۸] مد نظر ایشان قرار گرفته و مشاهده کاهش تولید CO، NO_x و HC توسط ایشان گزارش شده است. گروه بولتز [۹] به مطالعه اثر دمای پیش‌گرم و غلظت اکسیژن در ساختار شعله HiTAC پرداختند. ایتو و همکارش [۱۰]، تسوجی و گروهش [۱۱] و مورتبرگ و همکارانش [۱۲] هر یک به صورت جداگانه گزارش کرده‌اند که یکی از اصلی‌ترین ویژگی‌های HiTAC افزایش حجم شعله و یکنواختی میدان دمایی در محفظه احتراق است. گوپتا [۷ و ۵] و گروه مورتبرگ [۱۳] گزارش کرده‌اند که با افزایش دمای پیش‌گرم و کاهش درصد اکسیژن، اندازه و حجم شعله افزایش یافته و همچنین به علت یکنواختی بسیار بالای دما در محفظه احتراق، می‌توان راکتور هم‌دما را به کوره HiTAC اطلاق کرد. گزارش‌های تسوجی [۱۱] و هاسگاوا و گروهش [۱۴] بیانگر این مطلب است که تحت شرایط HiTAC می‌توان تولید آلاینده‌ها را ۵۰ درصد، حجم محفظه احتراق را تا ۲۵ درصد و مصرف سوخت را تا ۳۰ درصد کاهش داد.

گوپتا و همکارانش [۷ و ۶] نشان داده‌اند که تحت شرایط ویژه، اکسیداسیون سوخت در HiTAC بدون شعله مرئی انجام می‌شود. کاهش صدای شعله در این نوع احتراق نیز توسط وونینگ [۱۵] گزارش شده است. مبحث نحوه اختلاط گازها در محفظه احتراق و میزان تاثیر اختلاط در دمای شعله و نوسان آن و تولید NO_x توسط کاتسوکوی و همکارانش [۱۶] مطالعه شده است. با توجه به ویژگی‌های این شرایط احتراقی نظیر بازده بالای احتراقی، کاهش تولید آلاینده‌ها، صدای کمتر، منطقه واکنش گسترده‌تر، کم شدن نوسانات دما و گونه‌های شیمیایی در منطقه واکنش که در مطالعات تجربی آشکار شده است، بحث مدلسازی عددی این پدیده نیز در خور اهمیت بوده و قابل بررسی است. از ویژگی‌های متمایز این شرایط احتراقی نسبت به سایر پدیده‌های احتراقی، سرعت و نرخ واکنش بسیار پایین و در نتیجه عدد دامکوهلر کوچک و نزدیک به یک است [۱۷ و ۱۸]. لذا بحث مدلسازی عددی آن نیز با فرض‌های متداول مدلسازی احتراق نظیر واکنش سریع تطابق ندارد.

محققان متعددی به مدلسازی عددی شرایط احتراقی مذکور پرداخته‌اند؛ ماروتا و همکارانش [۱۹] ساختار منطقه واکنش را در احتراق بدون شعله سیستم جریان متقابل (Counter flow)، مدلسازی یک‌بعدی کرده و کاهش نرخ واکنش را گزارش کرده‌اند. دالی و همکارانش در طی سلسله تحقیقات منظم به بررسی نتایج حاصل از به کارگیری مدل‌های مختلف در مدلسازی جریان آشفته احتراقی تحت شرایط پیش‌گرم در رقیق‌سازی بالا پرداخته‌اند [۲۰-۲۲]. بلازیاک و همکارانش در دانشگاه KTH با استفاده از یک کوره نیمه‌صنعتی به صورت تجربی و عددی روی این شرایط احتراقی تحقیقات قابل توجهی انجام داده‌اند. ایشان نیز در بخش عددی به اعمال مدل‌های مختلف احتراقی و اغتشاشی پرداخته‌اند [۲۳-۲۵]. کواهلو و همکارش پیتتر [۲۶] در سال ۲۰۰۱ احتراق Mild را به روش فلیملت (Flamelet) به منظور بررسی اثر متقابل آشفستگی و شیمی واکنش بررسی کردند. اگر چه به صورت کیفی بین نتایج تجربی و عددی تشابه وجود داشت اما در محاسبه زمان اقامت مواد و میزان تولید آلاینده‌ها مشکل و خطا دیده می‌شود. گروه ارنسپه [۲۷] در سال ۲۰۰۱ نیز سه روش Eddy Dissipation، PDF/Mixture و Eddy Break up را برای مدلسازی احتراق گاز طبیعی تحت شرایط دما بالا استفاده و اعلام کردند که در نزدیکی دهانه سوخت هر سه روش با مشکل مواجه هستند. گالتی و همکارانش [۲۸] نیز در سال ۲۰۰۷ یک مشعل بدون شعله (Flameless) را به روش EDC/FRC مدلسازی کردند و نشان دادند که عدد دامکوهلر در منطقه واکنش نزدیک به یک است.

در جریان آشفته معمولاً اثر نفوذ مولکولی در مقایسه با نفوذ اغتشاشی اندک و قابل صرف‌نظر کردن است [۲۹]. بارلو و همکارانش [۲۹] در سال ۲۰۰۵ به صورت تجربی نشان دادند که در شعله پیش‌مخلوط متقارن محوری با افزایش رینولدز فواره (Jet) و فاصله از دهانه خروجی فواره، اثر انتقال مولکولی تضعیف و اثر انتقال اغتشاشی تقویت می‌شود. اما در احتراق HiTAC به نظر می‌رسد این گونه نبوده و نمی‌توان از آن صرف‌نظر کرد [۱۱ و ۱۹]. در مورد احتراق Mild، این موضوع در تحقیق دالی [۲۰] به صورت عددی بررسی شده و نشان داده شده است که استفاده از ضرایب نفوذ متفاوت^۵ برای گونه‌های شیمیایی

^۵ Differential Diffusion (Diff-Diff)

نسبت به ضرایب نفوذ یکسان، موجب بهبود جواب‌ها خواهد شد و نباید صرف‌نظر شود. اهمیت این متغیر در تحقیقات گروه پارتته [۳۰] تا حدی مورد تردید واقع شده است. اگرچه احتراق و آزاد شدن انرژی منجر به تضعیف گردابه‌ها و آرام‌سازی جریان آشفته می‌شود [۳۱]، اما در مورد میزان این اثر که منجر به افزایش اهمیت نفوذ مولکولی خواهد شد در احتراق تحت شرایط پیش‌گرم بالا و رقیق‌سازی زیاد، احتراق Mild، لازم است که تحقیقات بیشتری انجام شود.

با توجه به اطلاعات نویسندگان بحث مدلسازی احتراق Mild و ویژگی‌های آن هنوز نیازمند مطالعات بیشتری است. لذا در مقاله جاری نحوه مدلسازی عددی احتراق Mild و اهمیت در نظر گرفتن ضرایب نفوذ متفاوت برای گونه‌های شیمیایی در مدلسازی مورد توجه قرار گرفته و تأثیر متغیرهای دیگری نظیر غلظت اکسیژن و رینولدز روی احتراق Mild مطالعه شده است.

معادلات حاکم و مدلسازی عددی

با توجه به مطالعات و ارزیابی نتایج تجربی پژوهشگران مختلف، سیستم و نتایج تجربی دالی [۲۰ و ۲۲] مبنای مطالعه و مدلسازی قرار گرفت. همان‌طور که در شکل (۱) نشان داده شده است، مدل تجربی یک شعله متقارن محوری (Co-flow) است. مشعل مذکور در یک تونل باد با سرعت هوای ۳/۲ متر بر ثانیه به گونه‌ای که محور مشعل موازی جریان تونل باشد، قرار گرفته است.



شکل ۱- مشعل مورد استفاده دالی (JHC) [۲۲] شکل ۲- هندسه به کار رفته در مدلسازی عددی (شکل مقیاس نشده است)

مسئله به صورت دوبعدی و متقارن محوری مدل شده است. شکل (۲) مدل به کار رفته در مدلسازی عددی را نشان داده است. برای مدلسازی از کدی که بر مبنای الگوریتم سیمپلر^۶ (Simpler) پاتانکار که توسط رحمان [۳۳] در شبکه هم‌مکان اعمال شده و به حل معادلات بقای RANS^۷ می‌پردازد، استفاده شده است. جهت گسسته‌سازی معادلات از روش بالادست مرتبه سوم QUICK استفاده شده است. شکل مقطع‌های (Profile) سرعت در ورودی، از مدلسازی جریان در بالادست مشعل (داخل ورودی‌ها) به دست آمده است. مطالعات عددی نشان داد که میدان به میزان اغتشاشات در ورودی هوای گرم و هوای تونل باد حساس نبوده و فقط به میزان اغتشاشات ورودی از نازل سوخت حساس است. نتایج مشابهی را نیز گروه مدول [۳۴] گزارش کرده است. با توجه به دقیق نبودن میزان اغتشاشات ورودی فواره سوخت در مقاله تجربی مرجع [۳۲]، از طریق آزمایش‌های عددی میزان اغتشاشات ورودی فواره سوخت ۷ درصد در نظر گرفته شده است. با توجه به نتایج دالی [۲۰] مدل $k-\epsilon$ استاندارد به عنوان مدل اغتشاشی انتخاب شده و ضریب $C_{\epsilon 1}$ آن در معادله استهلاک انرژی اغتشاش از ۱/۴۴ به ۱/۶ تغییر یافته است.

با توجه به ویژگی‌های احتراق Mild نظیر پایین بودن نرخ واکنش و هم‌ارزی مقیاس زمانی احتراق و آشفستگی [۱۷ و ۲۰-۲۱] می‌توان منطقه واکنش را همانند ناحیه‌ای با ویژگی‌های WSR^۸ در نظر گرفت. در این صورت مدل احتراقی^۹ EDC، که توسعه یافته مدل ED^{۱۰} و با امکان در نظر گرفتن سازوکار شیمیایی کامل در جریان آشفته است، به نظر مناسب می‌آید [۳۵]. این

^۶ Semi-Implicit Method

^۷ Reynolds Average Navier Stokes Equations

^۸ Well Stirred Reactor

^۹ Eddy Dissipation Concept

^{۱۰} Eddy Dissipation Model

مدل میدان حل را به صورت نواحی با ابعاد $\zeta = c_\tau \left(\frac{v_\varepsilon}{k^2} \right)^{\frac{3}{4}}$ که در واقع هر ناحیه به صورت یک CPR^{11} است و مواد در داخل این ناحیه در طی مدت زمان $\tau = c_\tau \left(\frac{v}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}}$ و تحت فرایند نرخ محدود و مطابق قانون آرنیوس واکنش می‌دهند، در نظر می‌گیرد. در این روابط v گرانیوی سینماتیکی، ε نرخ استهلاک انرژی اغتشاش، k انرژی اغتشاش، c_τ ضریب نسبت حجمی برابر با $2/1377$ ، c_τ ثابت زمانی برابر با $0/4082$ هستند.

این مدل توسط تحقیقات دالی [20] و یانگ [23] نیز مناسب معرفی شده است. لذا مدل احتراقی EDC جهت مدلسازی رابطه آشفستگی جریان و شیمی واکنش‌ها انتخاب شده است.

نتایج تحقیق دالی [20] حاکی از آن است که تشعشع گرمایی در مشعل JHC، اثر قابل توجهی در نتایج مدلسازی ندارد، لذا با توجه به هزینه سنگین محاسبات انتقال گرمای تشعشعی از آن در تحقیق جاری صرف نظر شده است.

سازوکارهای شیمیایی به کار رفته در تحقیق جاری سه سازوکار مطابق جدول (1) هستند. سازوکار DRM22 و DRM19 سازوکارهای کاهش یافته [36]GRI1.2 با به ترتیب 22 و 19 گونه شیمیایی و 104 و 84 واکنش رفت و برگشت‌اند.

جدول 1- سازوکارهای شیمیایی مورد استفاده و مشخصات آن‌ها

ردیف	نام	تعداد گونه، تعداد واکنش شیمیایی	توضیحات	مرجع
1	دو مرحله‌ای متان+یک مرحله‌ای هیدروژن	3, 5	Westbrook an dryer+ H ₂ global	40
2	DRM- 22	104, 22	کاهش یافته GRI1.2 و بدون واکنش‌های N ₂	38
3	GRI 2.11	279, 49	سازوکار کامل	39

جدول 2- مشخصات آزمایش‌های انجام شده در تحقیق جاری (درصدهای گونه‌های مخلوط به صورت جرمی اند).

شماره آزمایش	رینولدز جت سوخت	سرعت و دمای هوای پیش‌گرم و رقیق‌شده	سرعت و دمای هوای تولد باد	ترکیب سوخت	ترکیب هوای پیش‌گرم و رقیق شده ورودی	ترکیب هوای رقیق شده	ضریب نفوذ ثابت ¹	ضریب نفوذ متغیر ²	معادله نفوذ ³	سازوکار شیمیایی
1	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20% H ₂ +80% CH ₄	9% O ₂ +6.5% H ₂ O+5.5% CO ₂ +79% N ₂	23% O ₂ +77% N ₂	*			overall
2	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20% H ₂ +80% CH ₄	3% O ₂ +6.5% H ₂ O+5.5% CO ₂ +85% N ₂	23% O ₂ +77% N ₂	*			DRM-22
3	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20% H ₂ +80% CH ₄	3% O ₂ +6.5% H ₂ O+5.5% CO ₂ +85% N ₂	23% O ₂ +77% N ₂		*		DRM-22
4	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20% H ₂ +80% CH ₄	3% O ₂ +6.5% H ₂ O+5.5% CO ₂ +85% N ₂	23% O ₂ +77% N ₂			*	DRM-22
5	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20% H ₂ +80% CH ₄	3% O ₂ +6.5% H ₂ O+5.5% CO ₂ +85% N ₂	23% O ₂ +77% N ₂		*		GRI2.11
6	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20% H ₂ +80% CH ₄	9% O ₂ +6.5% H ₂ O+5.5% CO ₂ +79% N ₂	23% O ₂ +77% N ₂	*			DRM-22
7	10000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20% H ₂ +80% CH ₄	9% O ₂ +6.5% H ₂ O+5.5% CO ₂ +79% N ₂	23% O ₂ +77% N ₂		*		DRM-22
8	5000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20% H ₂ +80% CH ₄	3% O ₂ +6.5% H ₂ O+5.5% CO ₂ +85% N ₂	23% O ₂ +77% N ₂	*			DRM-22
9	5000	3.2m/s, 1300k	3.2m/s, 305k	20% H ₂ +80% CH ₄	3% O ₂ +6.5% H ₂ O+5.5% CO ₂ +85% N ₂	23% O ₂ +77% N ₂		*		DRM-22

1-Constant and equal diffusion coefficient for all species

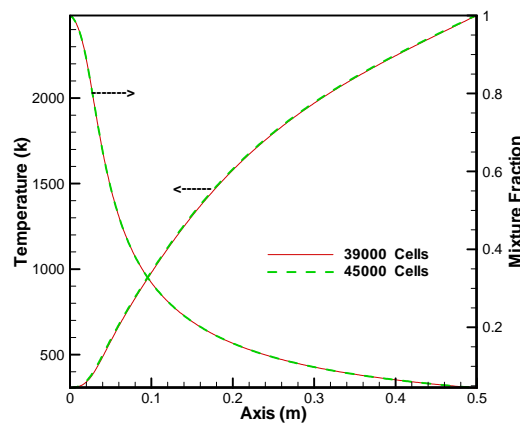
2-Differential diffusion coefficient for species base on kinetic theory

3-Multi-component diffusion equations

¹¹ Constant Pressure Reactor

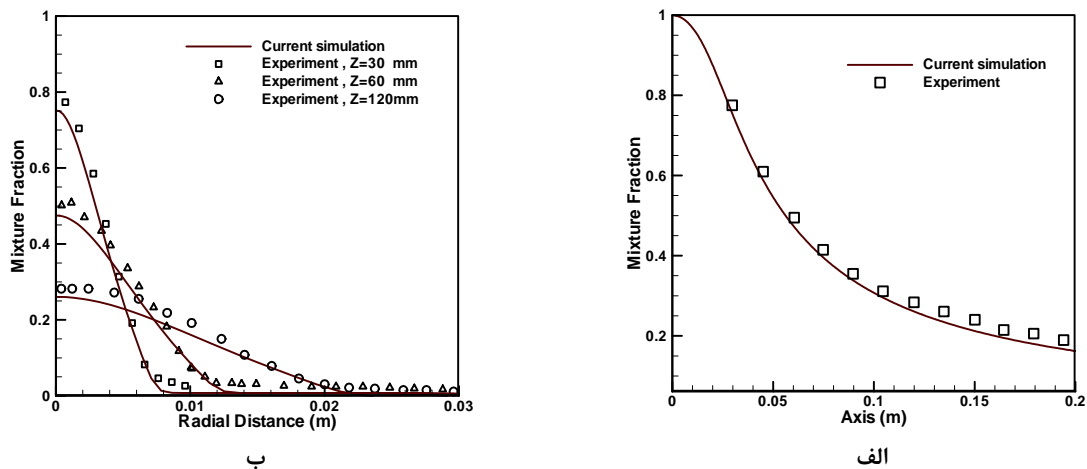
گروه پارتنته [۱۵] عملکرد مناسب سازوکار DRM19 در مقایسه با سازوکار کامل [۳۷]GRI3.0، در مدلسازی احتراق Mild را نشان داده‌اند. گروه کازاکو [۳۸] نیز عملکرد بهتر DRM22 را در مقایسه با DRM19 در پیش‌بینی زمان تاخیر در جرقه و سرعت شعله آرام گزارش کرده‌اند. در نهایت سازوکار کاهش یافته DRM-22 پس از اطمینان نویسندگان از دقت مناسب نتایج آن در مقایسه با سازوکار کامل [۳۹]GRI2.11 به عنوان سازوکار شیمیایی در تحقیق جاری استفاده شده است. مشخصات آزمون‌های عددی انجام شده در تحقیق جاری در جدول (۲) ارائه شده است.

پس از اطمینان از مستقل بودن جواب‌ها از شبکه در نهایت شبکه‌ای سازمان یافته با ۳۹۰۰۰ سلول و با شرایط نشان داده شده در شکل (۲)، در تمام مدلسازی‌ها استفاده شده است. عدم وابستگی نتایج مدلسازی به شبکه برای نمونه آزمایش شماره ۱ جدول (۲) در شکل (۳) نشان داده شده است. جهت اطمینان از همگرایی حل نیز دو معیار مد نظر قرار گرفته است که عبارت‌اند از کاهش باقی‌مانده جرمی معادله بقای جرم در الگوریتم عددی سیمپلر تا حد کوچک‌تر از ۰/۰۰۰۱ و عدم نوسان یک متغیر مهم در یک نقطه حساس میدان (مانند محل بیشینه دما) تا حد بیشتر از ۰/۱ درصد.



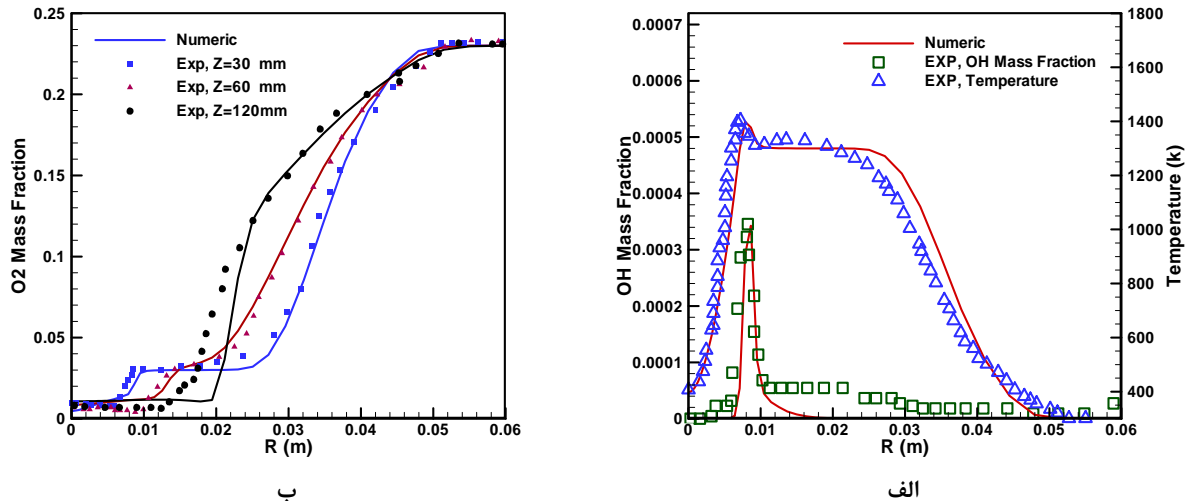
شکل ۳- مقایسه توزیع محوری دما و کسر مخلوط در دو شبکه متفاوت، آزمایش شماره ۱ جدول (۲)

در گام نخست برای اطمینان از صحت مدلسازی انجام شده، در شکل (۴) توزیع کسر مخلوط (Mixture Fraction) با توجه به تعریف بیلگر [۴۱] در مورد آزمایش شماره ۱ جدول (۲) نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود توزیع گونه‌های شیمیایی و توسعه فواره به خوبی با توجه به فرض‌های انجام شده منطبق بر نتایج تجربی هستند.



شکل ۴- توزیع کسر مخلوط و مقایسه با نتایج تجربی مرجع [۲۰] برای فواره‌ای با $Re=10000$ و سازوکار شیمیایی دو مرحله‌ای، آزمایش شماره ۱ جدول (۲): الف) در محور مشعل ب) در فاصله‌های ۳۰، ۶۰ و ۱۲۰ میلی‌متری از دهانه نازل

در شکل (۵-الف) توزیع شعاعی دما و گونه شیمیایی OH در فاصله ۳۰ میلی متری دهانه نازل با نتایج تجربی مقایسه شده است. دیده می شود بین نتایج عددی و تجربی تطابق قابل قبولی وجود دارد. در شکل (۵-ب) توزیع شعاعی O₂ با نتایج تجربی در فاصله های ۳۰، ۶۰ و ۱۲۰ میلی متری دهانه نازل مقایسه شده اند. این شکل نشان می دهد که مدلسازی در فاصله ۳۰ میلی متری دقت مناسبی دارد اما در فاصله ۱۲۰ میلی متری بین نتایج تجربی و عددی در محدوده شعاع ۰/۰۲ متری اختلاف وجود دارد. کمتر بودن غلظت O₂ در این محدوده نسبت به نتایج تجربی بیانگر این مطلب است که در این ناحیه شدت واکنش ها بیشتر از حد واقعی پیش بینی شده است و یا به عبارت دیگر مدل در پیش بینی خاموشی های موضعی در فاصله های دور از نازل به اندازه کافی دقیق نبوده است. در نتایج دالی [۲۰] نیز به این مطلب اشاره شده است.



شکل ۵- الف) مقایسه نتایج تجربی و عددی مربوط به توزیع شعاعی دما و گونه OH در فاصله ۳۰ میلی متری دهانه نازل
ب) مقایسه توزیع شعاعی گونه O₂ با نتایج تجربی در سه فاصله ۳۰، ۶۰ و ۱۲۰ میلی متری دهانه نازل، آزمایش شماره ۳ جدول (۲)

اثر نفوذ مولکولی

در یک سیستم چند جزئی معادلات بقای اجزای شیمیایی به صورت معادله (۱) هستند:

$$\frac{\partial Y_i \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho Y_i (\bar{V} + v_i) = \omega_i \quad (1)$$

که در آن Y_i کسر جرمی گونه شیمیایی i ام، ρ چگالی مخلوط، \bar{V} بردار سرعت متوسط جریان، v_i بردار سرعت نفوذ گونه i ام و ω_i نرخ تولید و یا مصرف گونه i ام است. به منظور حل معادلات بقا می بایست سرعت نفوذ جرمی که در معادلات ظاهر می شود، مشخص شود. معمولاً دو راه مورد استفاده قرار می گیرد. روش تقریبی عبارت است از استفاده از قانون اول فیک و جایگزینی سرعت نفوذ با حاصل ضرب ضریب نفوذ جزء شیمیایی در مخلوط در گرادینان غلظت آن. در روش دوم که دقیق تر است، سرعت نفوذ از معادله نفوذ چند جزئی به دست می آید. پس از صرف نظر از اثرات سورت^{۱۲} و دافور^{۱۳} و اعمال بعضی تغییرات و استفاده از قانون فیک به معادله (۲) خواهیم رسید [۳۱].

$$\frac{\partial Y_i \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{V} Y_i) = -\nabla \cdot \bar{J}_i + \omega_i \quad (2)$$

$$\bar{J}_i = -\left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_i \quad (2-f)$$

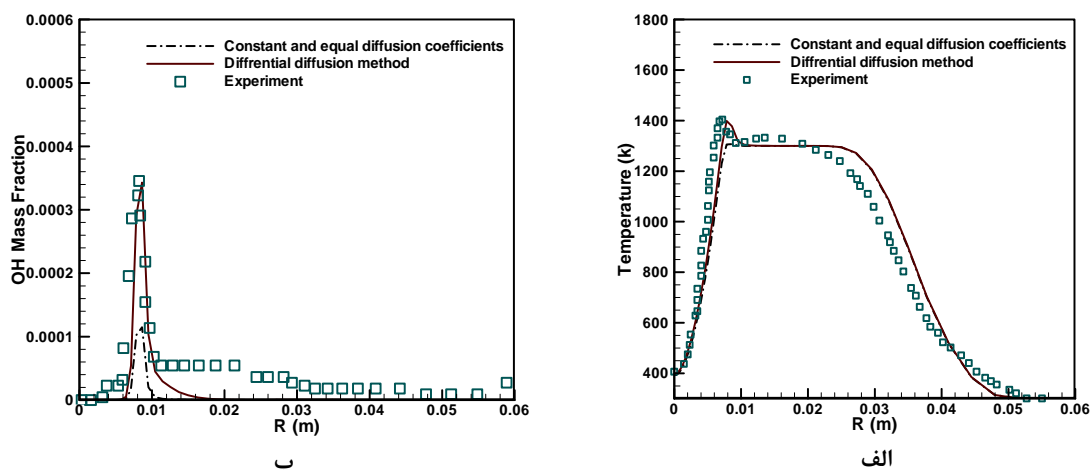
$$\bar{J}_i = -\sum_{j=1}^{N-1} \rho D_{ij} \nabla Y_j - \frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla Y_i \quad (2-b)$$

^{۱۲} Soret effect

^{۱۳} Dufour effect

در معادله (۲-الف) از قانون اول فیک استفاده شده است و $D_{i,m}$ عبارت است از ضریب نفوذ جزء i ام در مخلوط که از نظریه سینتیک مولکولی محاسبه شده است [۴۲] و در معادله (۲-ب) $D_{i,j}$ ضرایب نفوذ حاصل از معادله نفوذ چند جزئی ماکسول- استفان اند [۴۳]. در معادله بقای اجزا از نظریه جنبشی مولکولی برای محاسبه ضرایب نفوذ دوتایی استفاده شده است. در جریان آشفته معمولاً نفوذ مولکولی (قسمت اول در سمت راست معادلات (۲-الف) و (۲-ب)) زیر سایه نفوذ اغتشاشی (قسمت دوم در سمت راست معادلات (۲-الف) و (۲-ب)) قرار گرفته و از آن کوچکتر است [۲۰ و ۳۹]. لذا اغلب اهمیت چندانی پیدا نمی‌کند. در نتیجه می‌توان با دقت خوبی از معادله (۲-الف)، با توجه به هزینه محاسباتی کمتر آن، به جای معادله (۲-ب) استفاده کرد. همچنین ساده‌سازی دیگری که معمولاً در احتراق آشفته برای کمتر کردن هزینه محاسباتی مد نظر قرار می‌گیرد، استفاده از یک ضریب نفوذ مولکولی یکسان و ثابت برای تمام اجزای شیمیایی به جای ضریب $D_{i,m}$ در معادله (۲-الف) است.

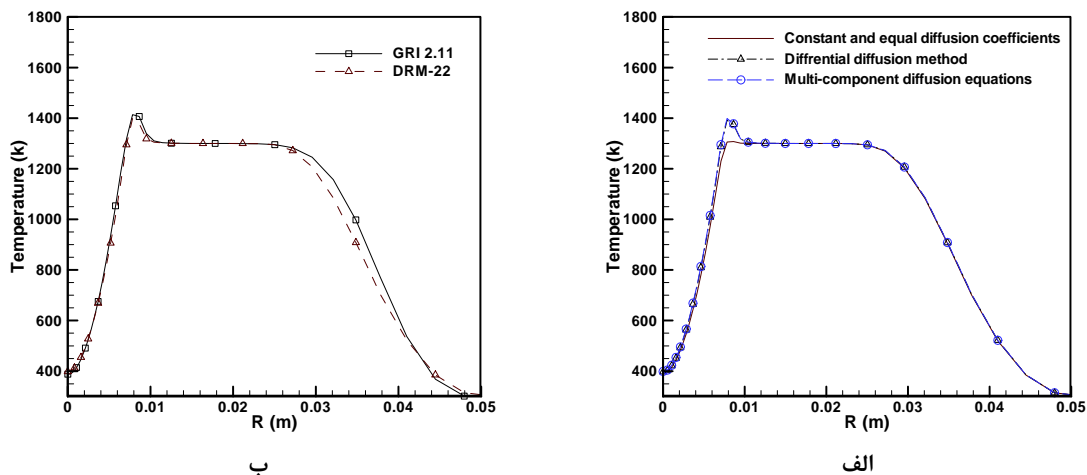
برای بررسی نحوه اثرگذاری نفوذ مولکولی در گام اول در شکل (۶) نتایج مدل‌سازی آزمایش شماره ۲ و ۳، ارائه شده در جدول (۱)، مقایسه شده است. در آزمایش شماره ۲ که ضرایب نفوذ مولکولی ثابت و یکسان در نظر گرفته شده‌اند، بیشینه دما به درستی پیش‌بینی نشده است. زیرا میزان نرخ واکنش در محل بیشینه دما کمتر از مقدار واقعی به دست آمده است. اما در آزمایش شماره ۳ که نفوذ مولکولی دقیق‌تر لحاظ شده، میزان و محل وقوع واکنش شیمیایی که محل بیشینه دماست و همچنین میزان نرخ واکنش و آزاد شدن انرژی که با دما مرتبطاند بسیار بهتر پیش‌بینی شده‌اند. در شکل (۶) شکل مقطع‌های دما که بیانگر شدت آزاد شدن انرژی و گونه OH که نشان‌دهنده جبهه شعله است در فاصله ۳۰ میلی‌متری از دهانه نازل هستند.



شکل ۶- مقایسه نتایج تجربی و عددی مربوط به توزیع دما و گونه OH در فاصله ۳۰ میلی‌متری از دهانه نازل سوخت، برای دو حالت مدل‌سازی با احتساب ضرایب نفوذ متغیر و متفاوت برای تمام اجزا و ضریب نفوذ ثابت، آزمایش‌های شماره ۲ و ۳ در جدول (۱)

گروه هیلبرت [۴۴] نشان دادند که در مدل‌سازی شعله آشفته غیر پیش‌مخلوط هیدروژن انتخاب مدل انتقال مولکولی بسیار مهم است. از این رو، قبل از ادامه محاسبات شاید بهتر باشد که استقلال نتایج به دست آمده از مدل انتقال مولکولی به کار رفته در محاسبات بررسی شود. شکل (۷-الف) نتایج مدل‌سازی با در نظر گرفتن سه مدل؛ ۱- قانون فیک و ضرایب نفوذ ثابت و یکسان برای تمام گونه‌های شیمیایی ۲- قانون فیک و ضرایب نفوذ دوتایی (Binary) با استفاده از نظریه جنبشی مولکولی (معادله ۲-الف) ۳- حل معادله دقیق نفوذ (معادله ۲-ب)، برای انتقال مولکولی در معادله بقای اجزای شیمیایی نشان داده شده است. دیده می‌شود که برای وارد کردن اثرات انتقال مولکولی استفاده از معادله (۲-الف) و (۲-ب) در مسئله جاری دارای دقت مشابهی بوده و علی‌رغم روش ضرایب نفوذ ثابت یکسان برای تمام گونه‌های شیمیایی، هر دو روش قابلیت مدل‌سازی مناسب منطقه واکنش که در آن دما بیشینه است را به وجود آورده‌اند. لذا می‌توان نتیجه گرفت که استفاده از ضرایب نفوذ متفاوت برای تمام اجزای شیمیایی (معادله ۲-الف) با توجه به هزینه محاسباتی کمتر آن نسبت به حل معادله نفوذ چند جزئی در تحقیق جاری مناسب‌تر است.

با بیان نظریه جنبشی مولکولی تعداد اجزای شیمیایی در محاسبه ضریب نفوذ هر جزء موثر است [۴۲]. در این بخش با تغییر تعداد اجزا و در نتیجه سازوکار شیمیایی در مورد تاثیرگذاری سینتیک شیمیایی بر اهمیت توجه به پدیده انتقال مولکولی در احتراق Mild مطالعه شده است. مشاهده نتایج دو سازوکار DRM-22 که کاهش یافته GRI1.2 است و سازوکار کامل GRI2.11 در شکل (۷-ب) بیانگر این مطلب است که هر دو سازوکار نتایج بسیار مشابهی به ویژه در نواحی نزدیک به محور شعله که ناحیه غنی از سوخت است به دنبال خواهند داشت. از مشابه بودن نتایج دو سازوکار شیمیایی با اختلاف زیاد تعداد اجزا و واکنش‌های شیمیایی می‌توان به این نکته پی برد که نبود تطابق‌ها بین نتایج عددی و تجربی در برخی از نواحی به ویژه در فاصله‌های دور از دهانه نازل متاثر از سازوکار شیمیایی نیست. در تحقیق گروه مانچینی نیز به این مسئله اشاره شده است [۴۵].



شکل ۷- الف) اثر اعمال روش‌های مختلف محاسبه نفوذ مولکولی در محاسبات بر توزیع شعاعی دمای محاسبه شده برای ۳ درصد اکسیژن در فاصله ۳۰ میلی‌متری، آزمایش شماره ۲، ۳ و ۴ جدول (۲) ب) اثر استفاده از دو سازوکار شیمیایی متفاوت در توزیع شعاعی دمای محاسبه شده، آزمایش‌های شماره ۳ و ۵ جدول (۲)

با توجه به نتایج حاصل در ادامه با توجه به هزینه محاسباتی کمتر سازوکار DRM-22، از آن به عنوان سازوکار پایه در مدلسازی‌ها استفاده شده است.

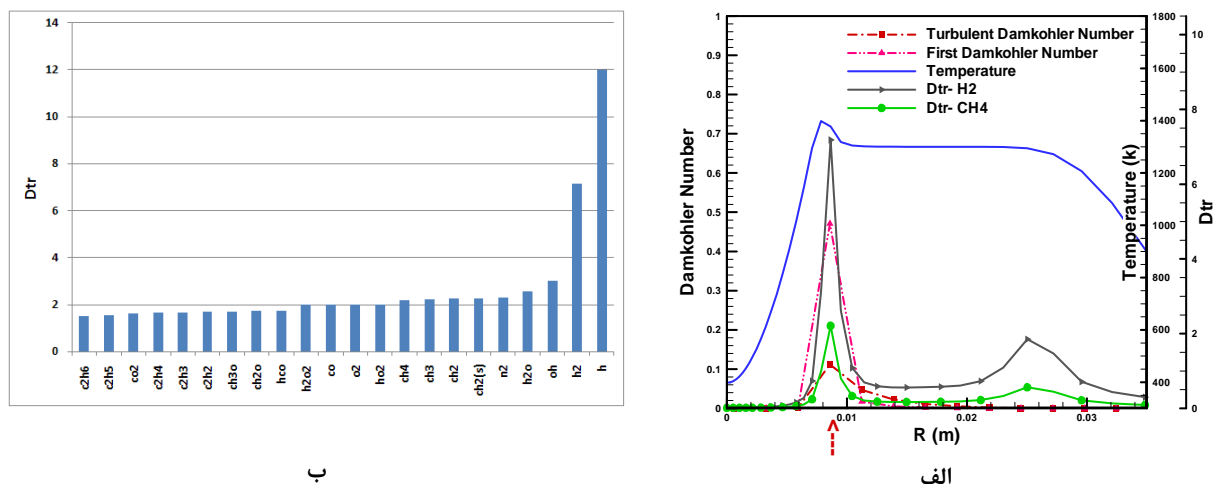
برای بررسی دقیق‌تر سازوکار انتقال اجزای شیمیایی، به مقایسه نسبت نفوذ مولکولی به نفوذ اغتشاشی برای تمام اجزا در میدان حل پرداخته شده است. این نسبت با توجه به معادله (۲-الف) مطابق رابطه زیر است و از این به بعد با عبارت Dtr_i آن را نمایش خواهیم داد. در این عبارت ξ اشاره به گونه شیمیایی دارد.

$$Dtr_i = \frac{\left| \rho D_{i,m} \nabla Y_i \right|}{\left| \frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla Y_i \right|} \equiv \frac{\text{Molecular transport}}{\text{Turbulence transport}}$$

در شکل (۸-الف) توزیع شعاعی این متغیر برای دو گونه H_2 و CH_4 در فاصله ۳۰ میلی‌متری از دهانه نازل نشان داده شده است. برای درک بهتر میزان این نسبت در محل بیشینه اول شکل (۸-الف) که با فلش مشخص شده، مقایسه مقدار Dtr_i آن برای تمامی اجزای شیمیایی در شکل (۸-ب) ارائه شده است.

شکل (۸-الف) بیانگر این مطلب است که در دو ناحیه به طور مشخص اهمیت نفوذ مولکولی به مراتب بالاتر از انتقال ناشی از اغتشاش است؛ ابتدا در فاصله تقریبی ۹ میلی‌متری که در واقع جبهه شعله است و در اثر افزایش دما و لذا افزایش انرژی جنبشی مولکول‌ها نفوذ مولکولی به شدت بالاست و ناحیه دیگر در محل تقریبی اختلاط هوای داغ Co-flow و هوای تونل باد است. در این ناحیه آخری به دلیل هم‌سرعت بودن هوای تونل باد و هوای داغ (۳/۲ متر بر ثانیه) و اغتشاش کم هوای

تونل باد در واقع میزان انتقال ناشی از اغتشاشات کوچک خواهد شد. با توجه به شکل (۸-ب) دیده می‌شود که تمام گونه‌ها بیشتر توسط سازوکار انتقال مولکولی جابه‌جا می‌شوند تا سازوکار انتقال اغتشاشی. این مسئله در گونه‌های سبک‌تر مثل OH، H و H₂ بسیار پررنگ بوده و در گونه‌های سنگین‌تر دوکربنی کم‌رنگ‌تر است. نکته دیگر اینکه انتقال مولکولی در بیرون از جبهه شعله و در سمت جریان هوا نسبت به سمت داخلی آن و نزدیک محور شعله بسیار قوی‌تر است. علت این موضوع دمای بالای هوای Co-flow و اغتشاش کم آن است.



شکل ۸- الف) توزیع شعاعی دما، عدد دامکوهلر اول و اغتشاشی و نسبت Dtr_i در فاصله ۳۰ میلی‌متری دهانه نازل ب) مقایسه نسبت Dtr_i برای تمام گونه‌های شیمیایی در $R=8.6mm$ که با فلش در بخش (الف) مشخص شده است، آزمایش شماره ۳ جدول (۲).

برای مشخص شدن محل و نحوه اثرگذاری نفوذ مولکولی در شعله به ارائه تغییرات عدد دامکوهلر در فاصله ۳۰ میلی‌متری از دهانه نازل در شکل (۸-الف) پرداخته شده است. عدد دامکوهلر که بیانگر نسبت مقیاس زمانی جریان (یا آشفستگی) به مقیاس زمانی انجام واکنش شیمیایی است، به دو صورت زیر محاسبه شده است.

$$Da_T \equiv \left(\frac{vk^2}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}}; \quad k = \frac{\omega}{\rho} \quad (3)$$

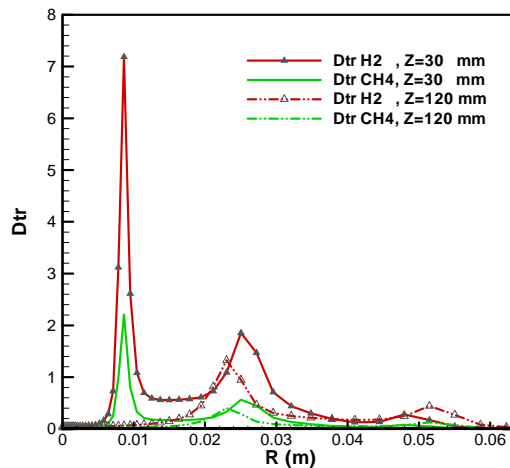
$$Da_f \equiv \frac{k}{St} \quad (2)$$

که Da_f عدد دامکوهلر اول جریان و Da_T عدد دامکوهلر اغتشاش است. v گرانیوی سینماتیکی، ε نرخ استهلاک انرژی اغتشاش، ρ چگالی و ω نرخ تولید و یا مصرف آرنیوس در واکنش شیمیایی بر واحد حجم و زمان است.

با استفاده از روابط بالا عدد دامکوهلر برای تمامی واکنش‌ها محاسبه شده و سپس بزرگ‌ترین آن‌ها برای نمایش انتخاب شده است (شکل ۸-الف). دیده می‌شود که بیشترین عدد دامکوهلر فقط در محل بیشینه دما مقدار قابل توجهی دارد که البته عدد کوچکی است و نشان می‌دهد که انجام واکنش بسیار کند و مقیاس زمانی واکنش و جریان به یکدیگر نزدیک‌اند، لذا فرایندهای انتقال اجزا نظیر نفوذ مولکولی که دارای سرعت کمی هستند، می‌توانند اثرگذار باشند. در بیشینه دوم نمودار نسبت انتقال مولکولی به انتقال آشفته، Dtr_i ، عدد دامکوهلر بسیار کوچک است زیرا نرخ انجام واکنش در این محل بسیار ناچیز است.

در شکل (۹) توزیع شعاعی Dtr_i برای دو گونه H_2 و CH_4 در دو فاصله ۳۰ و ۱۲۰ میلی‌متری از دهانه نازل مقایسه شده است. در جدول (۳) تغییرات بیشینه دما و کسر جرمی CO، OH و H₂O به صورت درصد تغییرات در اثر اعمال ضریب نفوذ متغیر به جای نفوذ مولکولی ثابت در مدلسازی ارائه شده است. دیده می‌شود که با افزایش فاصله از نازل اثرات نفوذ مولکولی کاهش می‌یابد. زیرا مقدار متغیر Dtr_i با دور شدن از نازل کاهش یافته است. همچنین اثر اعمال دقیق‌تر انتقال مولکولی در

مدلسازی در تغییر مقدار بیشینه متغیرها (یعنی در جبهه شعله) کاهش می‌یابد یعنی با اعمال ضرایب نفوذ متفاوت برای تمام گونه‌ها، حداکثر دما در ۳۰ میلی‌متری ۶/۶ درصد و در ۱۲۰ میلی‌متری ۴/۸ درصد و به همین ترتیب برای OH، ۱۹۷ درصد و ۱۵- درصد، برای CO، ۳۹ درصد و ۳۶ درصد و برای H₂O، ۱۴ درصد و ۸ درصد تغییر خواهند کرد. لذا از این دیدگاه شاید بتوان گفت که استفاده از مدل‌های دقیق‌تر محاسبه نفوذ مولکولی در نواحی نزدیک به دهانه نازل تاثیرگذارتر و مهم‌تر از نواحی دورتر از نازل سوخت است. نتایج مشابهی برای شعله نفوذی آشفته CH₄/H₂/N₂-air در حالت عادی (بدون پیش‌گرم و رقیق-سازی) توسط گروه پیچ [۴۶] نیز ارائه شده است.



شکل ۹- مقایسه توزیع شعاعی Dtr_i برای دو گونه CH_4 و H_2 در دو فاصله ۳۰ و ۱۲۰ میلی‌متری از دهانه نازل، آزمایش شماره ۳ جدول (۲)

جدول ۳- درصد تغییر بیشینه دما و کسر جرمی در سه فاصله مختلف از نازل در اثر اعمال ضرایب نفوذ متفاوت،

آزمایش‌های شماره ۲ و ۳ جدول (۲)

	$\varphi = \frac{\varphi_{Max,Diff-Diff} - \varphi_{Max,Con-Diff}}{\varphi_{Max,Con-Diff}}$			
فاصله از نازل	$\varphi = Y_{H_2O}$	$\varphi = Y_{CO}$	$\varphi = Y_{OH}$	$\varphi = Y_T$
۳۰ mm	٪ +۱۴	٪ +۳۹	٪ +۱۹۷	٪ +۶/۶
۶۰ mm	٪ +۶	٪ +۳۴	٪ +۷۸	٪ +۳/۸
۱۲۰ mm	٪ +۸	٪ +۳۶	٪ -۱۵	٪ +۴/۸

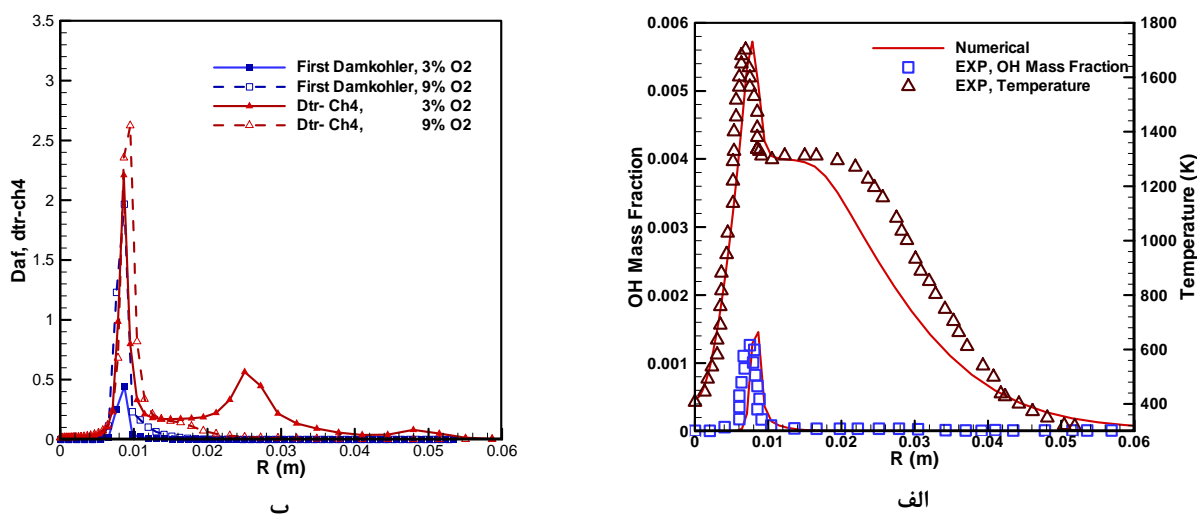
بررسی اثر درصد اکسیژن

یکی از متغیرهای اصلی احتراق Mild کاهش قابل توجه میزان اکسیژن در دسترس در منطقه واکنش در مقایسه با احتراق عادی است. در این بخش میزان اکسیژن هوای پیش‌گرم شده از ۳ درصد جرمی به ۹ درصد جرمی تغییر کرده است. در شکل (۱۰) توزیع شعاعی دما و گونه OH برای حالت ۹ درصد O₂ در فاصله ۳۰ میلی‌متری از دهانه نازل با نتایج تجربی مقایسه شده است. دیده می‌شود که انطباق بسیار خوبی بین نتایج محاسباتی و تجربی وجود دارد. همچنین مقایسه شکل (۱۰-الف) و (۵-الف) بیانگر این مطلب است که با افزایش درصد اکسیژن شدت واکنش‌ها افزایش یافته و از یکنواختی دما در میدان کاسته شده است اما مدل‌های به کار رفته در مدلسازی احتراق Mild همچنان عملکرد مناسبی در پیش‌بینی فرایند احتراق دارند.

برای بررسی بیشتر تاثیر اکسیژن در احتراق Mild توزیع شعاعی متغیر Dtr_i برای گونه CH₄ به عنوان نمونه و عدد دامکوهلر در فاصله ۳۰ میلی‌متری دهانه نازل برای دو حالت ۳ و ۹ درصد اکسیژن در شکل (۱۰) نشان داده شده است. این

شکل بیانگر این مطلب است که افزایش غلظت اکسیژن در هوای ورودی منجر به افزایش قابل توجه عدد دامکوهلر شده است. نکته دیگر قابل توجه این است که اگر چه با افزایش درصد اکسیژن بیشینه عدد دامکوهلر تقریباً ۴ برابر شده و از حدود ۰/۵ به ۲ افزایش یافته است، اما همچنان در مقایسه با احتراق‌های متعارف بسیار کوچک بوده و نشان از کند بودن سرعت واکنش‌های شیمیایی دارد.

از طرفی افزایش غلظت اکسیژن در هوای ورودی موجب محو شدن بیشینه دوم نمودار Dtr_i در حالت ۹ درصد اکسیژن شده است و اگر محدوده شعاعی که انتقال مولکولی در آن ناحیه مهم است و نسبت Dtr_i مطابق نمودار از حدود ۰/۱ بزرگ‌تر است را با عبارت Lde نام‌گذاری کنیم واضح است که $Lde_{3\%O_2} > Lde_{9\%O_2}$ ، به عبارت دیگر محدوده مکانی تاثیرگذاری انتقال مولکولی با افزایش میزان اکسیژن کوچک‌تر شده است. اما از طرفی دیگر مقدار بیشینه متغیر به مقدار بسیار کمی افزایش یافته است. برای ارزیابی بهتر قدرت انتقال مولکولی در غلظت‌های مختلف اکسیژن، در جدول (۴) تاثیر استفاده از ضرایب نفوذ متغیر (با تغییر دما) و متفاوت به جای یک ضریب ثابت و یکسان برای گونه‌های مختلف در نتایج مدل‌سازی برای ۳ و ۹ درصد اکسیژن مقایسه شده است. دیده می‌شود که اعمال ضرایب نفوذ متفاوت برای اجزا منجر به تغییر به ترتیب ۷ و ۴ درصدی دمای بیشینه (در فاصله ۳۰ میلی‌متری از دهانه نازل) و ۲۰۸ و ۸۷ درصدی کسر جرمی OH در حالت ۳ و ۹ درصد اکسیژن شده است. در مجموع می‌توان گفت که اهمیت نفوذ مولکولی در درصد‌های کمتر اکسیژن بیشتر و منطقه اثرگذاری آن در کل میدان حل وسیع‌تر است. اگرچه بحث انتقال مولکولی در هر دو درصد اکسیژن مهم بوده و توجه مناسب به آن در مدل‌سازی موجب بهبود نتایج به ویژه در نواحی نزدیک دهانه نازل خواهد شد.



شکل ۱۰- الف) مقایسه نتایج عددی و تجربی توزیع شعاعی دما و OH برای ۹ درصد O_2 در فاصله ۳۰ میلی‌متری از دهانه نازل (ب) نحوه تغییر توزیع عدد دامکوهلر و Dtr_{CH_4} در دو حالت ۳ و ۹ درصد O_2 ورودی در فاصله ۳۰ میلی‌متری از دهانه نازل، آزمایش‌های شماره ۲ و ۳ و ۶ و ۷ در جدول (۲)

جدول ۴- درصد تغییر بیشینه دما و کسر جرمی در دو درصد مختلف O_2 ورودی در فاصله ۳۰ میلی‌متری از نازل در اثر اعمال ضرایب نفوذ متفاوت، آزمایش‌های شماره ۲ و ۳ و ۶ و ۷ در جدول (۲)

	$\frac{\varphi_{Max,Diff-Diff} - \varphi_{Max,Con-Diff}}{\varphi_{Max,Con-Diff}} \times 100$	
درصد O_2	دما φ	کسر جرمی $\varphi = OH$
۳	٪۷	٪۲۰۸
۹	٪۴	٪۸۷

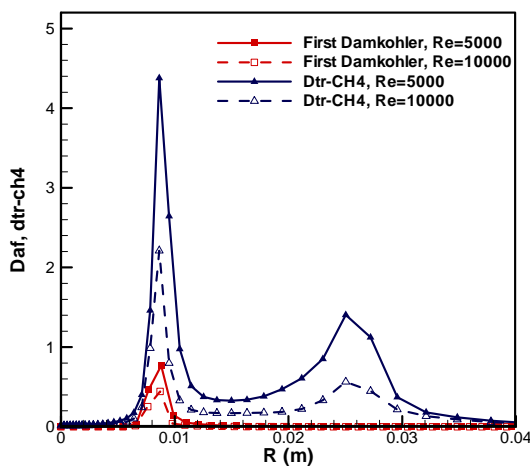
بررسی اثر عدد رینولدز

در این بخش به مشاهده نحوه تغییر ویژگی‌های احتراق Mild مورد بررسی در رینولدزهای مختلف پرداخته شده است. بدین منظور نتایج مدل‌سازی شعله در دو رینولدز ۵۰۰۰ و ۱۰۰۰۰ در شکل (۱۱) مقایسه شده است. شکل (۱۱-الف) بیانگر این مطلب است که با کاهش رینولدز فواره ورودی بیشینه دما به مقدار بسیار کمی افزایش یافته است. اگرچه غلظت گونه شیمیایی OH و رادیکال میانی CH_2O با افزایش رینولدز افزایش یافته است و تایید کننده افزایش نرخ آزادسازی گرماست. علت کاهش دما، احتمالاً افزایش انتقال گرما در اثر افزایش سرعت و در نتیجه افزایش جابه‌جایی جرم است. چنین نتایجی با آزمایش‌های تجربی گروه دالی [۳۴] مطابقت دارد.

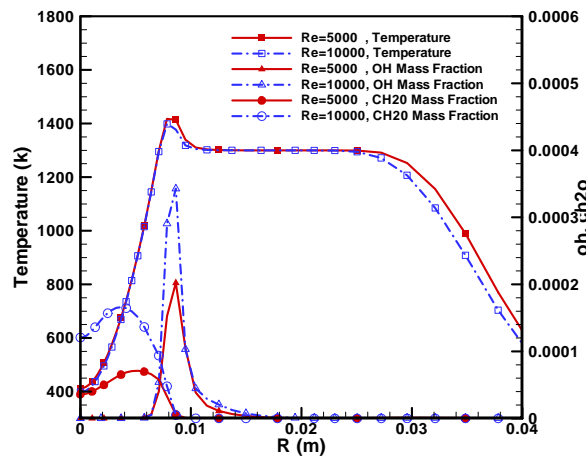
رادیکال OH (هیدرواکسیل) به عنوان نشان دهنده محل واکنش شناخته شده و گونه میانی CH_2O (فرمالدهید) نیز در محدوده‌های دما پایین احتراق Mild تولید می‌شود [۲۸] و حضور آن در محدوده غنی از سوخت نشان دهنده این مطلب است که در مراحل اولیه تجزیه سوخت تولید می‌شود [۴۷ و ۴۸]. همچنین هیدرواکسیل و فرمالدهید نشان دهنده حضور رادیکال HCO (فرمیل) هستند که آن نیز رابطه نزدیکی با نرخ آزادسازی گرما در واکنش‌ها دارد [۴۹].

برای بررسی عمیق‌تر اثر رینولدز در ویژگی‌های احتراق Mild، توزیع شعاعی نسبت Dtr_{CH_4} و عدد دامکوهلر برای دو رینولدز ۵۰۰۰ و ۱۰۰۰۰ و در فاصله ۳۰ میلی‌متری در شکل (۱۱-ب) نشان داده شده‌اند. نمودارهای Dtr_{CH_4} دارای دو قله‌اند، که قله اول در محل بیشینه نرخ آزادسازی گرما و منطقه دوم در محدوده لایه برشی جریان هوای داغ Co-flow و هوای سرد تونل باد پدیدار می‌شوند. نتایج حاکی از آن است که با افزایش رینولدز و افزایش اثر گرانیوی اغتشاشی اثر انتقال مولکولی کمتر خواهد شد زیرا نسبت Dtr_i در رینولدزهای بالاتر، کوچک‌تر است.

توجه به نمودار عدد دامکوهلر نیز نشان می‌دهد که دو برابر شدن رینولدز فواره ورودی منجر به کاهش عدد دامکوهلر می‌شود اگرچه مقدار این کاهش چندان قابل توجه نیست. از آنجایی که عدد دامکوهلر بیانگر رابطه مقیاس زمانی جریان و واکنش‌های شیمیایی است، کاهش عدد دامکوهلر در اثر افزایش رینولدز فواره ورودی نشان دهنده رابطه پیچیده دینامیک جریان و احتراق است و این مطلب نیازمند مطالعات دقیق‌تری است. در مجموع می‌توان گفت که در هر دو رینولدز ۵۰۰۰ و ۱۰۰۰۰ مقیاس زمانی واکنش‌های شیمیایی و آشفستگی جریان قابل قیاس بوده و یا به عبارت دیگر در مقابل یکدیگر قابل صرف‌نظر کردن نیستند.



ب



الف

شکل (۱۱-الف) توزیع شعاعی دما و گونه‌های OH و CH_2O برای دو رینولدز ۵۰۰۰ و ۱۰۰۰۰ در دو حالت اعمال ضریب نفوذ ثابت و یکسان برای تمام گونه‌ها و ضریب نفوذ متغیر با استفاده از نظریه سینتیک مولکولی در فاصله ۳۰ میلی‌متری دهانه نازل (ب) توزیع شعاعی عدد دامکوهلر و Dtr_{CH_4} برای دو رینولدز ۵۰۰۰ و ۱۰۰۰۰ در فاصله ۳۰ میلی‌متری دهانه نازل، آزمایش‌های شماره ۲ و ۳ و ۸ و ۹ در جدول (۲)

جمع بندی

در مقاله جاری شعله غیر پیش مخلوط سوخت متان- هیدروژن در شرایط رقیق سازی و پیش گرم بالا در حالی که شرایط جریان آشفته است مطالعه شده است. مقایسه نتایج عددی و تجربی نشان دهنده دقت خوب مدلسازی به ویژه در نواحی نزدیک نازل سوخت است. با دور شدن از نازل سوخت و در فاصله ۱۲۰ میلی متری اختلاف‌هایی بین نتایج تجربی و عددی دیده می‌شود که احتمالاً به علت عدم پیش‌بینی خاموشی‌های موضعی توسط معادلات و مدل‌های به کار رفته در آن نواحی است. زیرا استفاده از معادلات متوسط‌گیری شده نویراستوکس و مدل‌های مربوطه (مانند مدل آشفته‌گی به کار رفته) امکان مشاهده پدیده‌هایی را که در مقیاس گردابه‌های (Eddy) آشفته‌گی کوچک اتفاق می‌افتند، ندارند.

دیده شد که در شعله Mild انتقال مولکولی در مقابل انتقال گونه‌های شیمیایی از طریق جریان بسیار قدرتمند بوده و به ویژه در نواحی‌ای که نرخ واکنش بالاتر بوده و موجب پایداری شعله می‌شود، بسیار تاثیرگذار است و در مدلسازی عددی نمی‌توان از آن صرف‌نظر کرد. با در نظر گرفتن سه مدل؛ ۱- قانون فیک و ضرایب نفوذ ثابت یکسان برای تمام گونه‌های شیمیایی ۲- قانون فیک و ضرایب نفوذ دوتایی با استفاده از نظریه جنبشی مولکولی ۳- حل معادله دقیق نفوذ، برای انتقال مولکولی در معادله بقای اجزای شیمیایی، دیده شد که روش دوم و سوم نتایج مشابهی دارند و لذا با توجه به هزینه محاسباتی کمتر روش دوم توصیه می‌شود.

با استفاده از سازوکارهای شیمیایی مختلف اطمینان حاصل شد که اثرگذاری پدیده انتقال مولکولی و نتایج به دست آمده معلول سازوکار شیمیایی نیستند.

با دور شدن از دهانه نازل از قدرت انتقال مولکولی و وسعت محل اثرگذاری آن کاسته می‌شود، اما در نزدیکی دهانه نازل بسیار مهم است. نشان داده شد که در مخلوط‌های ضعیف‌تر از لحاظ غلظت اکسیژن و همچنین در رینولدز کوچک‌تر، پدیده انتقال مولکولی مهم‌تر، تاثیرگذارتر و در مدلسازی عددی قابل صرف‌نظر کردن نیست.

دیده شد که با کاهش غلظت اکسیژن، عدد دامکوهلر کاهش می‌یابد که نشان دهنده کاهش سرعت واکنش‌های شیمیایی است. همچنین یکنواختی دمایی افزایش می‌یابد.

با افزایش رینولدز فواره سوخت اگرچه غلظت رادیکال‌های میانی نظیر OH و CH_2O افزایش یافت، اما دمای بیشینه و عدد دامکوهلر به مقداری کمی کاهش می‌یابند. این مطلب نشان می‌دهد که لازم است در این زمینه مطالعات بیشتری انجام شود.

مراجع

- Weinberg, P. J., Combustion Temperatures: The Future?, Nature, 233, pp. 239-241, 1971.
- Hoffmann, J. G., Echigo, R., Yoshida, H., and Tada, S., "Experimental Study on Combustion in Porous Media with a Reciprocating Flow System," Combust. Flame, 111, pp. 32-46, 1997.
- Gupta, A. K., and Li, Z., "Effect of Fuel Property on the Structure of Highly Preheated Air Flames," Proceedings of Intl. Joint Power Generation Conference, Denver, CO, ASME EC-5, pp. 247-258, 1997.
- Cavaliere, A., and Joannon, M. D., Mild Combustion, Energy and Combustion Science, 30, pp. 329-366, 2004.
- Gupta, A. K., and Li, Z., "Effect of Fuel Property on the Structure of Highly Preheated Air Flames," Proceedings of Intl. Joint Power Generation Conference, Denver, CO, ASME EC- 5, pp. 247-258, 1997.
- Gupta, A. K., "Flame Characteristics and Challenges with High Temperature Air Combustion," Proc. of Intl. Joint Power Generation Conference (IJPGC), Phoenix, AZ, 2000.
- Gupta, A. K., "Flame Length and Ignition Delay During the Combustion of Acetylene in High Temperature air," Invited Paper, Proceedings of the 5th High Temperature Air Combustion and Gasification Conference, Yokohama, Japan, 2002.
- Gupta, A. K., "Thermal Characteristics of Gaseous Fuel Flames using High Temperature Air," ASME J. Engr. Gas Turbine Power, 126, NO, 1, pp. 9-19, 2004.
- Bolz, S., and Gupta, A. K., "Effect of Air Preheat Temperature and Oxygen Concentration on Flame Structure and Emissions," Proc. Intl. Joint Power Joint Generation Conference (IJPGC98), Baltimore, MD, ASME FACT, 22, pp. 193-205, August, 1998.
- Ito, Y., Gupta, A. K., Yoshikawa, K., and Shimo, N., "Combustion Characteristics of Low Calorific Value Gas with High Temperature and Low-Oxygen Concentration Air," Proceedings of the 5th High Temperature Air Combustion and Gasification Conference, Yokohama, Japan, 2002.

11. Tsuji, H., Gupta, A. K., Hasegawa, T., Katsuki, K., Kishimoto, K., and Morita, M., "High Temperature Air Combustion: From Energy Conservation to Pollution Reduction," CRC Press, Boca Raton, FL, 2003.
12. Mortberg, M., Blasiak, W., and Gupta, A. K. "Experimental Investigation of Flow Phenomena of a Single Fuel Jet in Cross-Flow During Highly Preheated Air Combustion Conditions," ASME J. for Gas Turbines and Power (In press), 2006.
13. Mortberg, M., Blasiak, W., and Gupta, A. K. "Flameless Combustion of Methane Fuel Jet Injected Into Transverse High Temperature Air Flow," Proc. 6th Intl. Conference on High Temperature Air Combustion and Steam Gasification (HTACG), Essen, Germany, October, 2005.
14. Hasegawa, T., Mochida, S., and Gupta, A. K. "Development of Advanced Industrial Furnace using Highly Preheated Air Combustion," J. Propul. Power, 18, NO. 2, pp. 233-239, 2002.
15. Wunning, J. G., "Flameless Combustion in Thermal Process Technology," 2th International Seminar on High Temperature Air Combustion, Sweden, 2000.
16. Katsuki, M., and Ebisui, K., "Possibility of Low Nitric Oxides Emission from Regenerative Combustion System Using Highly Preheated Air," The First Asia-Pacific Conference on Combustion, pp. 294-297, Osaka, 1997.
17. Katsuki, M., and Hasegawa, T., "The Science and Technology of Combustion in Highly Preheated Air," 27 Symposium on Combustion, Combust. Inst., pp. 3135-3146, 1998.
18. Plessing, T., Peters, N., and Wunning, J. G., "Laser Optical Investigation of Highly Preheated Combustion with Strong Exhaust Gas Recirculation," 27 Symposium on Combustion/The Combustion Institute, pp. 3197-3204, 1998.
19. Maruta, K., Muso, K., Takeda, K., and Niioaka, T., "Reaction Zone Structure in Flameless Combustion," Proceeding of Combustion Institute, 28, pp. 2117-2123, 2000.
20. Christo, F. C., and Dally, B. B., "Modeling Turbulent Reacting Jets Issuing into a Hot and Diluted Co-flow," Combustion and Flame, 142, pp. 117-129, 2005.
21. Christo, F. C., and Dally, B. B., "Application of Transport PDF Approach for Modeling MILD Combustion," 15th Australasian Fluid Mechanics Conference, the University of Sydney, Sydney, Australia, 2004.
22. Christo, F. C., Dally, B. B., and Szego, G. G., A Hybrid RANS/PDF Approach for Modeling Hot and Diluted Flames, Report of the University of Adelaide, 2005.
23. Yong, W., Wei, D., and Blasiak, W., Mathematics Modeling for High Temperature Air Combustion (HiTAC), Summary Final Report, Royal Institute of Technology (KTH), ISSN 0280-249X, 2003
24. Yong, W., Wei, D., and Blasiak, W., "Numerical Study of Fuel Temperature Influence on Single Gas Jet Combustion in Highly Preheated and Oxygen Deficient Air," Energy, 30, pp. 385-398, 2005
25. Yong, W., Wei, D., and Blasia, W., "Flame Entrainments Induced by a Turbulent Reacting Jet Using High-Temperature and Oxygen-Deficient oxidizers," Energy & Fuels, 19, pp. 1473-1483.
26. Coelho, P. J., and Peters, N., "Numerical Simulation of a Mild Combustion Burner," Combust. Flame, 124, pp. 503-518, 2001.
27. Orsino, S. R., Weber, R. U., and Bolletini, U., "Numerical Simulation of Combustion of Natural Gas with High Temperature Air," Combustion Science and Technology, 170, pp. 1-34, 2001.
28. Galletti, C., Parente, A., and Tognotti, L., "Numerical and Experimental Investigation of a MILD Combustion Burner," Combustion and Flame, 151, pp. 649-66, 2007.
29. Barlow, R. S., Frank, J. H., Karpetsis, A. N., and Chen, J. Y., "Piloted Methane/Air jet Flames: Transport Effects and Aspects of Scalar Structure," Combustion and Flame, 143, pp. 433-449, 2005
30. Parente, A., Galletti, C., and Tognotti, L., "Effect of the Combustion Model and Kinetic Mechanism on the MILD Combustion in an Industrial Burner fed with Hydrogen Enriched Fuels," International Journal of Hydrogen Energy, 33, pp. 7553-7564, 2008.
31. Kuo, K. K., Principle of Combustion, Wiley, 1986
32. Dally, B. B., Karpetsis, A. N., and Barlow, R. S., "Structure of Turbulent Non-Premixed Jet Flames in a Diluted Hot Coflow," Proceeding of the Combustion Institute, 29, pp. 1147-1154, 2002
33. Rahman, M. M., Miettinen, A., and Siikonen, T., "Modified Simple Formulation on a Collocated Grid with an Assessment of the Simplified Quick Scheme," Numerical Heat Transfer, 30, NO. 3, pp. 291-314, 1996
34. Medwell, P. R., Kalt, P., and Dally, B. B., "Simultaneous Imaging of OH, Formaldehyde, and Temperature of Turbulent Non-Premixed Jet Flames in a Heated and Diluted Co-flow," Combustion and Flame, 148, pp. 48-61, 2006.
35. Gran, I. R., and Magnussen, B. F., "A Numerical Study of a Bluff-Body Stabilized Diffusion Flame. Part 2. Influence of Combustion Modeling and Finite-Rate Chemistry," Combustion Science and Technology, 119, pp. 191-217, 1996.
36. Frenklach, M., Wang, H., Yu, C. L., Goldenberg, M., Bowman, C. T., and Hanson, R. K., et al., "GRI-1.2," Available at http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
37. Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eiteneer, B., and Goldenberg, M., et al., "GRI-3.0," Available at http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
38. Kazakov A., and Frenklach, M., Reduced reaction sets based on GRIMech1.2., Available at <http://www.me.berkeley.edu/drm/>.
39. Bowman, C. T., Hanson, R. K., Davidson, D. F., Gardiner, W. C., Lissianski, Jr. V., Smith, G. P., Golden, D. M., M. Frenklach, and M. Goldenberg, "GRI-2.11," Available at http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/ (1995).
40. Westbrook, C., and Drye, F., "Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbons Fuels in Flames," Combustion Science and Technology, 27, pp. 31-43, 1981
41. Bilger, R. W., Starnes, S. H., and Kee, R. J., "On Reduced Mechanisms for Methane-Air Combustion in Nonpremixed Flames," Combust. Flame, 80, pp. 135-149, 1990.

42. Warnatz, J., Mass, U., and Dibble, R. W., *Combustion Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*, Third Edition, Springer, 1996.
43. Merk, H. J., "The Macroscopic Equations for Simultaneous Heat and Mass Transfer in Isotropic, Continuous and Closed Systems," *Appl. Sci. Res.*, 8, pp. 73-99, 1958.
44. Hilbert, R., Tap, F., El-Rabii, H., and Thevenin, D., "Impact of Detailed Chemistry and Transport Models on Turbulent Combustion Simulations," *Progress in Energy and Combustion Science*, 30, pp. 61-117, 2004.
45. Mancini, M., Schwoppe, P., Weber, R., and Orsino, S., "On mathematical Modelling of Flameless Combustion," *Combustion and Flame*, 150, pp. 54-59, 2007.
46. Pitsch, H., "Unsteady Flamelet Modeling of Differential Diffusion in Turbulent Jet Diffusion Flames," *Combustion and Flame*, 123, pp. 358-374, 2000.
47. Kohse-Hoinghaus, K., and Jeffries, J. B., *Applied Combustion Diagnostics*, Taylor & Francis, New York, 2002.
48. Bombach, R., and Kappeli, B., "Simultaneous Visualization of Transient Species in Flames by Planar- Laser-Induced Fluorescence Using a Single Laser System," *Appl. Phys. B* 68, pp.251-255.
49. Najm, H. N., Paul, P. H., Mueller, C. J., and Wyckoff, P. S., "On the Adequacy of Certain Experimental Observables as Measurements of Flame Burning Rate," *Combust. Flame*, 113, pp. 312-332, 1998.

English Abstract

A Numerical Study of the Effect of Flow Dynamics and Oxygen Concentration on Methane-Hydrogen Non-Premixed Flame in a Mild Combustion Regime

A. Mardani and S. Tabejamaat

Department of Aerospace Engineering, Amirkabir University of Technology

Mild is an acronym for moderate or intense low-oxygen dilution and refers to oxidizer high preheating and dilution. The Mild combustion has features which set it apart from other combustion systems, such as higher reaction zone volume, more uniform temperature distribution, lower reaction rate, lower heat release rate and lower Damkohler number in comparison with the ordinary combustion regime. In this paper, characteristics of the Mild regime were studied numerically. The experimental conditions of Dally et al. [Proc. Combust. Inst. 29 (2002) 1147-1154] were used for modelling in the present study. The EDC model was used to describe the turbulence-chemistry interaction. The DRM-22 reduced mechanism and the GRI 2.11 full mechanism were used to represent the chemical reactions of H₂/methane jet flame. The distribution of temperature, some species, reaction rates and also the importance of molecular diffusion for various O₂ levels and jet Reynolds numbers were investigated. The results show that the molecular diffusion in Mild combustion cannot be ignored in comparison with the turbulent transport. Also, the method of inclusion of molecular diffusion in combustion modelling has a considerable effect on the accuracy of numerical modelling of Mild combustion. By decreasing the jet Reynolds number and reducing the oxygen concentration in the airflow, the influence of molecular diffusion on Mild combustion increases. Moreover, the effect of the molecular diffusion reduces on reaction zone when moving away from the nozzle. Although the agreement between numerical and experimental results are very satisfactory, by distancing from the nozzle, the rate of reactions increases while deviation from Mild condition and numerical errors grows.

Keywords: Mild combustion, Turbulence, Dilution, Methane, Hydrogen