

شبیه‌سازی عددی احتراق در محیط متخلخل در حالت دو بعدی با استفاده از چهار سازوکار شیمیایی چند مرحله‌ای مختلف

سیامک حسین پور* و نگین معلمی خیاوی**

دانشگاه صنعتی سهند، دانشکده مهندسی مکانیک

(دریافت: ۱۳۸۹/۴/۱، پذیرش: ۱۳۸۹/۷/۲۲)

در تحقیق حاضر، یک برنامه رایانه‌ای در محیط فرترن برای شبیه‌سازی دو بعدی احتراق پیش آمیخته هوا-متان در محیط متخلخل نوشته شده است. در کنار این برنامه، از برنامه *CHEMKIN II* و اطلاعات پایه آن استفاده شده است. معادلات ناویر استوکس، معادلات انرژی فاز جامد و گاز و معادلات انتقال حاکم بر گونه‌های شیمیایی با استفاده از روش حجم محدود حل شده و برای ارتباط دادن سرعت و فشار از الگوریتم سیمپل (*SIMPLE*) استفاده شده است. محفظه احتراق مورد مطالعه، یک محفظه مستطیلی متشکل از دو ناحیه است که ناحیه اول، ناحیه پیش گرمایش و ناحیه دوم، ناحیه احتراق است. مهم‌ترین کار انجام شده در این مقاله، استفاده از چهار سینتیک شیمیایی چند مرحله‌ای متفاوت برای شبیه‌سازی واکنش‌های شیمیایی و بررسی اثر استفاده از این چهار سازوکار شیمیایی بر پیش‌بینی توزیع (*Profile*) دما، جزء جرمی گونه‌های شیمیایی و انتشار آلودگی‌هاست. همچنین تاثیر تغییر ضریب هدایت گرمایی مواد متخلخل نیز بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد با افزایش ضریب انتقال گرمای هدایت در پایین دست شعله، دمای گاز و ماده متخلخل در ناحیه احتراق کاهش می‌یابد و این کاهش دما موجب کاهش انتشار آلاینده‌ها می‌شود. همچنین نتایج حاصل از پیش‌بینی چهار سازوکار شیمیایی احتراق مختلف با یکدیگر مطابقت دارند.

واژگان کلیدی: احتراق، کوره متخلخل، روش حجم محدود، سینتیک شیمیایی، انتقال گرما

مقدمه

در سال‌های اخیر، احتراق در محیط متخلخل مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است. چرا که این سیستم‌ها دارای مشخصات منحصر به فردی از جمله محدوده توان دینامیکی زیاد، چگالی توان بالا، انتشار کمتر آلاینده‌هایی مانند CO و NO_x و سرعت بالای سوختن هستند. در واقع، احتراق در محیط متخلخل به دو دلیل مهم از سیستم‌های احتراقی شامل شعله آزاد متمایز می‌شود. این دو دلیل عبارت‌اند از: سطح تماس زیاد ماده متخلخل که موجب انتقال گرمای موثر بین جامد و گاز می‌شود و اختلاط خوب سوخت و اکسیدکننده که موجب نفوذ و انتقال گرمای موثر در فاز گازی می‌شود. در احتراق شعله آزاد، کل احتراق در یک محیط گازی اتفاق می‌افتد در حالی که در محیط متخلخل، در یک ماتریس جامد سه بعدی که حفره‌های به هم پیوسته دارد، روی می‌دهد. بازده احتراق در محیط متخلخل بیشتر از سیستم‌های احتراق معمول است که این امر نتیجه انتقال گرمای بهتر و موثر از طریق هدایت و تشعشع از سطوح گرم شده است. در واقع آنتالپی گاز احتراقی ماتریس متخلخل را گرم می‌کند. این سطح گرم شده، ماتریس جامد را در ناحیه پیش گرمایش به وسیله هدایت و تشعشع گرم می‌کند. در نتیجه دمای جامد در ناحیه پیش گرمایش بیشتر از دمای گاز ورودی است و بنابراین مخلوط نسوخته ورودی توسط ترکیبی از انتقال گرمای هدایت و تشعشع، پیش گرمایش می‌شود. این سازوکار برگشت انرژی از طرفی موجب افزایش بازده و نرخ احتراق شده و از طرف دیگر با کاهش دمای بیشینه شعله باعث کاهش انتشار آلاینده‌ها و هیدروکربن‌های نسوخته می‌شود.

* دانشیار - نویسنده مخاطب (ایمیل: hossainpour@sut.ac.ir)

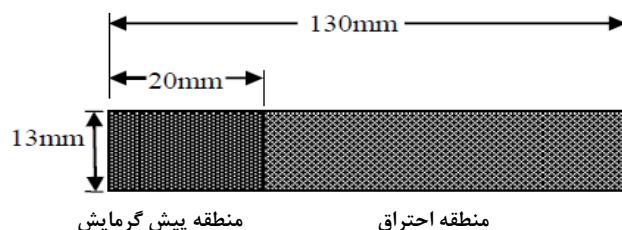
** دانشجوی کارشناسی ارشد (ایمیل: negin.moallemi@yahoo.com)

توسعه و بهینه‌سازی مشعل‌های محیط متخلخل، نیازمند شبیه‌سازی تجربی و عددی خواهد بود. از آنجا که تحقیقات آزمایشگاهی مستلزم صرف وقت و هزینه زیاد است، استفاده از شبیه‌سازی عددی برای بررسی عملکرد و تاثیر متغیرهای مختلف بر روی توزیع دما و نحوه تولید آلاینده‌ها ضروری به نظر می‌رسد. بیشتر محققان، برای شبیه‌سازی احتراق و انتقال گرما در چنین سیستم‌هایی از شبیه‌سازی عددی استفاده کرده‌اند. بیشتر این تحقیقات یک بعدی بوده و از سینتیک شیمیایی یک مرحله‌ای برای شبیه‌سازی واکنش‌های شیمیایی بهره گرفته‌اند. یاشیزاوا و همکارانش در سال ۱۹۸۸ یک شبیه‌سازی عددی یک بعدی با استفاده از سینتیک یک مرحله‌ای انجام دادند. آن‌ها اثرات تغییر ویژگی‌های انتقال گرما را روی سرعت سوختن و ساختار شعله مطالعه کردند [۱]. زو و پیرا در سال ۱۹۹۷ با استفاده از یک سازوکار چند مرحله‌ای (۲۷ گونه و ۷۳ واکنش) یک مدل‌سازی عددی انجام دادند. آن‌ها نشان دادند که انتشار CO و NO_x به طور قابل ملاحظه‌ای در محیط متخلخل کاهش می‌یابد [۲]. چانگ جن به وسیله حل عددی یک بعدی، اثرات افزودن هیدروژن روی احتراق متان را در کوره‌های متخلخل مورد بررسی و تحلیل قرار دادند [۳]. آماندا جی باررا و همکارانش در سال ۲۰۰۳ یک مطالعه عددی یک بعدی برای مدل کردن یک کوره متخلخل دو قسمتی انجام دادند. آن‌ها اثرات ویژگی‌های مواد متخلخل را روی پایداری شعله بررسی کردند [۴]. حسین پور و حدادی در سال ۲۰۰۸ اثرات متغیرهای کوره متخلخل را روی احتراق و تشکیل آلاینده‌ها مطالعه کردند. آن‌ها از یک مدل یک بعدی و سینتیک چند مرحله‌ای استفاده کردند. نتایج تحقیقات آن‌ها نشان می‌دهد که انتشار CO و NO به طور عمده بستگی به ضریب انتقال گرمای حجمی و ضریب پخش ماده متخلخل دارد [۵].

علاوه بر شبیه‌سازی‌های عددی یک بعدی تعداد کمی شبیه‌سازی دو بعدی نیز انجام شده است. یک مدل‌سازی عددی دو بعدی توسط محمد و همکارانش در سال ۱۹۹۴ برای پیش‌بینی بازده گرمایی، توزیع دما و نیز افت فشار با استفاده از سازوکار یک مرحله‌ای انجام شده است. آن‌ها اثرات تغییر در هندسه، اندازه حفره، هدایت گرمایی، سرعت سوختن و نسبت هوای اضافی را بر روی توزیع دما و انتشار آلاینده‌ها بررسی کردند [۶]. بیدی و همکارانش در سال ۲۰۰۷ یک مطالعه عددی دو بعدی بر روی احتراق در محیط متخلخل انجام دادند. آنها نشان دادند که سینتیک شیمیایی چند مرحله‌ای منجر به نتایج دقیق‌تر برای توزیع دما و جزء جرمی گونه‌های شیمیایی می‌شود [۷]. ابراهیمی و همکارانش در سال ۲۰۰۷ با استفاده از یک سینتیک چند مرحله‌ای شامل ۷ گونه و ۵ واکنش، احتراق در محیط متخلخل را شبیه‌سازی کردند. آن‌ها برای شبیه‌سازی از یک مدل عددی دو بعدی استفاده کرده و اثرات نسبت هوای اضافی و متغیرهای تشعشع فاز جامد را بررسی کردند. نتایج تحقیقات آن‌ها نشان می‌دهد که افزایش نسبت هوای اضافی موجب کاهش دمای بیشینه و کاهش انتشار آلاینده‌هایی همچون CO و NO می‌شود [۸]. به نظر می‌رسد که مدل‌سازی یک بعدی کوره‌های متخلخل برای کوره‌هایی با هندسه پیچیده که برای افزایش محدوده توان دینامیکی و کاربردهای دیگر به کار می‌روند، چندان دقیق نباشد. بنابراین این مقاله، شبیه‌سازی عددی دو بعدی احتراق پیش آمیخته هوا-متان را در محیط متخلخل ارائه می‌دهد و برای شبیه‌سازی واکنش‌های شیمیایی از چند سازوکار احتراقی چند مرحله‌ای متفاوت استفاده می‌کند که قبلاً این کار در حالت دو بعدی انجام نگرفته است. در این شبیه‌سازی معادلات ناویر استوکس، معادلات انرژی فاز جامد و گاز و معادلات انتقال گونه‌های شیمیایی حل شده‌اند. برای گسسته‌سازی معادلات به دست آمده از روش حجم محدود استفاده شده است و فشار و سرعت از طریق الگوریتم سیمپل به هم ارتباط داده شده‌اند. در این مدل، معادلات انرژی جداگانه‌ای برای فاز جامد و گاز حل شده است که این دو معادله از طریق انتقال گرمای حجمی به هم مربوط می‌شوند. انتقال گرمای تشعشع در ماتریس جامد توسط ضریب انتقال گرمای موثر بیان شده است که در قسمت‌های بعدی توضیح داده خواهد شد. نرخ پیشرفت واکنش‌های شیمیایی، ویژگی‌های ترموفیزیکی و ترموشیمیایی توسط برنامه CHEMKINII و اطلاعات پایه آن به دست آمده است [۹].

کوره متخلخل مورد مطالعه

در این مقاله، یک کوره مستطیلی با توان ۵kw در نظر گرفته شده است که شامل دو منطقه است: یک منطقه پیش گرمایش و یک منطقه احتراق (شکل ۱).



شکل ۱- کوره متخلخل دو قسمتی مورد مطالعه

معمولا منطقه پیش گرمایش از موادی با تخلخل کمتر و هدایت گرمایی پایین و منطقه احتراق از موادی با تخلخل و هدایت گرمایی بالا ساخته می‌شود. همچنین اندازه حفره در منطقه احتراق بزرگ است. دلیل انتخاب موادی با هدایت گرمایی کمتر و اندازه حفره کوچک‌تر در منطقه پیش گرمایش، جلوگیری از احتراق در این منطقه است. با این توضیحات، ویژگی‌های مواد متخلخل استفاده شده در کوره مورد مطالعه در جدول (۱) آمده است.

جدول ۱- ویژگی‌های مواد متخلخل استفاده شده در کوره مورد مطالعه

ناحیه پیش گرمایش	ناحیه احتراق
ضریب هدایت = $0/1 \times 10^5 \text{ w / m - k}$	ضریب هدایت = $0/5 \times 10^5 \text{ w / m - k}$
ضریب همرفت = $1 \times 10^7 \text{ w / m}^3 - \text{k}$	ضریب همرفت = $1 \times 10^8 \text{ w / m}^3 - \text{k}$
تخلخل = $0/7$ ، قطر حفره = $0/55$	تخلخل = $0/85$ ، قطر حفره = $0/6$

معادلات حاکم

در این مقاله، یک هندسه متقارن دو بعدی، جریان پایدار، آرام و نیوتنی و ماده متخلخل همگن با اثرات کاتالیستی ناچیز در نظر گرفته شده است. برای شبیه‌سازی واکنش‌های شیمیایی از چهار سازوکار احتراقی متفاوت استفاده شده است. با فرض‌های ذکر شده، معادلات به دست آمده به قرار زیر هستند [۱۰]:

معادله پیوستگی

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}_s) = 0 \quad (1)$$

معادلات تکانه (Momentum)

$$\nabla \cdot (\rho u \mathbf{v}_s) = \nabla \cdot (\mu \nabla u) - \frac{\partial p}{\partial x} - \left(\frac{\Delta p}{\Delta L} \right)_x \quad (2)$$

$$\nabla \cdot (\rho v \mathbf{v}_s) = \nabla \cdot (\mu \nabla v) - \frac{\partial p}{\partial y} - \left(\frac{\Delta p}{\Delta L} \right)_y \quad (3)$$

برای محاسبه افت فشار در ماتریس متخلخل از معادله فورهایمر (Forchheimer) استفاده شده است.

$$\left(\frac{\Delta p}{\Delta L} \right)_i = \frac{\mu}{k_1} \mathbf{v}_s + \frac{\mu}{k_2} \mathbf{v}_s | \mathbf{v}_s | \quad (4)$$

که k_1 و k_2 به ترتیب تانسورهای نفوذپذیری برای جریان مغشوش و آرام هستند و \mathbf{v}_s بیانگر سرعت ظاهری (Superficial) است که در محیط متخلخل به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\mathbf{v}_s = \varepsilon \mathbf{v} \quad (5)$$

که در آن ε بیانگر تخلخل ماده متخلخل است.

معادله انرژی فاز گاز

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}_s c_p T_f) = \nabla \cdot (\varepsilon \lambda_f \nabla T_f) + H(T_s - T_f) - \sum_{k=1}^{N_s} \dot{\omega}_k h_k \quad (6)$$

که H ضریب انتقال گرمای حجمی، T_s دمای ماده متخلخل، T_f دمای مخلوط گاز، C_p ظرفیت گرمایی ویژه مخلوط گاز، λ_f و ρ به ترتیب ضریب هدایت گرمایی و چگالی مخلوط گاز هستند.

معادله انرژی فاز جامد

$$0 = \nabla \cdot ((1 - \varepsilon)\lambda_{eff_i} \nabla T_s) + H(T_f - T_s) \quad (7)$$

که ضریب انتقال گرمای هدایت موثر (λ_{eff_i}) به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\lambda_{eff_i} = \lambda_{eff}^{\circ} + \frac{\dot{m} \cdot C_p \cdot d}{K_1} \quad (8)$$

هدایت گرمایی موثر به دو قسمت تقسیم می‌شود. یکی برای انتقال گرمای هدایتی بدون وجود جریان λ_{eff}° و دیگری برای اثرات نفوذ همرفت. قسمت دوم بستگی به شار جرمی ($\frac{\dot{m}}{A}$)، ظرفیت گرمایی ویژه C_p ، قطر مشخصه d و ضرایب پخش گرمایی مدل (K_1 و K_2) دارد [۱۱ و ۱۲].

معادلات بقای گونه‌های شیمیایی

$$\nabla \cdot (\rho v_s Y_k) = \nabla \cdot (\rho \varepsilon D_{Km} \nabla Y_k) + \dot{\omega}_k, \quad k \in [1, N_s] \quad (9)$$

که در این رابطه N_s تعداد گونه‌های شیمیایی است.

ویژگی‌های ترموشیمیایی و ترموفیزیکی برای مخلوطی از N_s گونه توسط زیربرنامه TRANFIT و اطلاعات ترمودینامیکی پایه CHEMKIN II به دست می‌آید. نرخ تولید یا از بین رفتن گونه‌ها به دلیل واکنش‌های شیمیایی به عنوان جمله چشمه/چاه در معادلات انرژی گاز و انتقال گونه‌های شیمیایی وارد می‌شود.

$$\dot{\omega}_k = M_k \sum_{l=1}^{N_R} (v''_{kl} - v'_{kl}) K_l \cdot (\prod_{reactants} c^{v'_{kl}} - \frac{1}{K_C} \prod_{products} c^{v''_{kl}}) \quad (10)$$

که N_R تعداد واکنش‌های شیمیایی، M_k وزن مولکولی، v'_{kl} و v''_{kl} ضرایب استوکیومتریک گونه شیمیایی A_k در سازوکار واکنش شیمیایی و K_C ثابت تعادل شیمیایی است.

$$\sum_{k=1}^{N_s} v'_{kl} A_k \leftrightarrow \sum_{k=1}^{N_s} v''_{kl} A_k \quad (11)$$

ثابت ویژه سرعت واکنش (K_l)، از رابطه آرنیوس به صورت زیر تعریف شده است.

$$k_l = k_l^0 T^{\beta_l} \exp\left(-\frac{E_l}{RT}\right) \quad (12)$$

فاکتور فرکانس برخورد (k_l^0 Collision Frequency)، توان دما β_l و انرژی فعالسازی E_l برای هر واکنش در سازوکار احتراق انتخابی تعیین شده است [۱۳].

شرایط مرزی

شرایط مرزی زیر برای به دست آوردن معادلات در نظر گرفته شده است.

ورودی

$$u = u_{in}, v = 0, T_g = T_{g,in}, Y_i = Y_{i,in}, (1 - \varepsilon)\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} = -\varepsilon_r \sigma (T_s^4 - T_0^4) \quad (13)$$

که در آن ε_r ضریب انتشار سطح، σ ثابت استفان-بولتزمان و T_0 دمای محیط است که برابر ۳۰۰ کلوین در نظر گرفته شده است.

خروجی

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial T_g}{\partial x} = \frac{\partial Y_i}{\partial x} = 0, (1 - \varepsilon)\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} = -\varepsilon_r \sigma (T_s^4 - T_0^4) \quad (14)$$

خط تقارن

$$\frac{\partial u}{\partial y} = v = \frac{\partial T_g}{\partial y} = \frac{\partial T_s}{\partial y} = \frac{\partial Y_i}{\partial y} = 0 \quad (15)$$

دیوار

در دیوار شرط عدم لغزش و غیرقابل نفوذ برای معادلات تکانه اعمال شده و گرادیان جزء جرمی عمود بر دیوار صفر در نظر گرفته شده و برای معادلات انرژی شرط دما ثابت اعمال شده است.

مدل عددی

برای گسسته‌سازی معادلات به دست آمده، از روش حجم محدود استفاده شده است و فشار و سرعت از طریق الگوریتم سیمپل به هم ارتباط داده شده‌اند. مقیاس همگرایی برای روش تکرار 1×10^{-5} در نظر گرفته شده است. فضای محاسباتی، یک شبکه قائم با 26×300 گره است. به دلیل سخت بودن (Stiffness) معادلات انرژی گاز و انتقال گونه‌های شیمیایی، جملات چشمه مربوط به این معادلات توسط زیربرنامه DVODE حل می‌شوند [۱۴]. جملات چشمه مذکور به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) = w_k \cdot W_k \quad (16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_p T_f) = - \sum_{k=1}^{N_s} \dot{\omega}_k h_k W_k \quad (17)$$

زیربرنامه DVODE معادلات دیفرانسیل معمولی فوق را براساس الگوریتم هیندمارش-گیر (Hindmarsh-Gear) حل می‌کند. در نهایت جزء مولی جدید و دمای گاز جدید، $[Y_i]^{new}$ و $[T_f]^{new}$ به صورت زیر محاسبه می‌شوند.

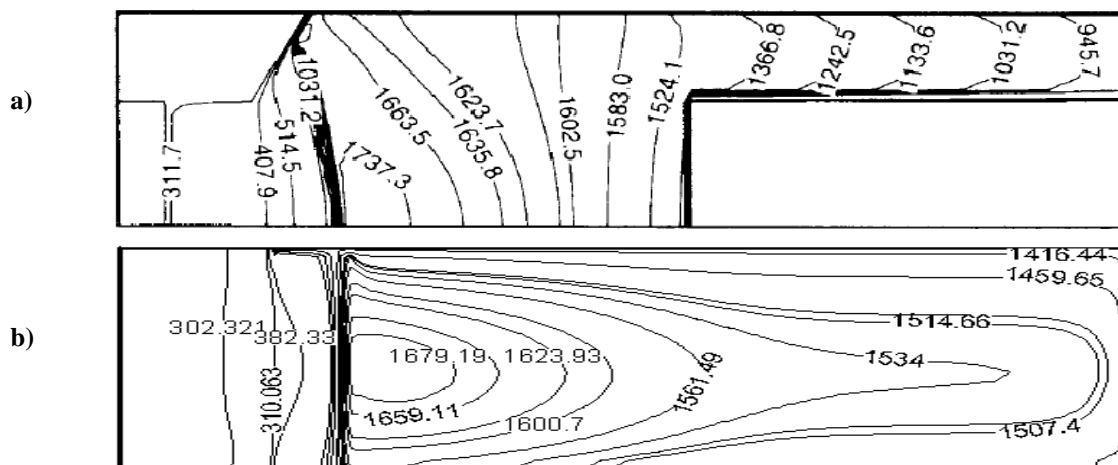
$$[Y_i]^{new} = [Y_i]^{old} + [\Delta Y_i]^{transport} + [\Delta Y_i]^{source} \quad (18)$$

$$[T_g]^{new} = [T_g]^{old} + [\Delta T_g]^{transport} + [\Delta T_g]^{source} \quad (19)$$

که $[Y_i]^{old}$ و $[T_g]^{old}$ به ترتیب جزء جرمی و دمای گاز در تکرار قبلی، $[\Delta Y_i]^{transport}$ و $[\Delta T_g]^{transport}$ به ترتیب تفاضل جزء جرمی و دما قبل و بعد از حل معادلات (۸) و (۵) و $[\Delta Y_i]^{source}$ و $[\Delta T_g]^{source}$ به ترتیب تفاضل جزء جرمی و دما قبل و بعد از حل معادلات (۱۶) و (۱۷) هستند [۱۰].

نتایج و بحث

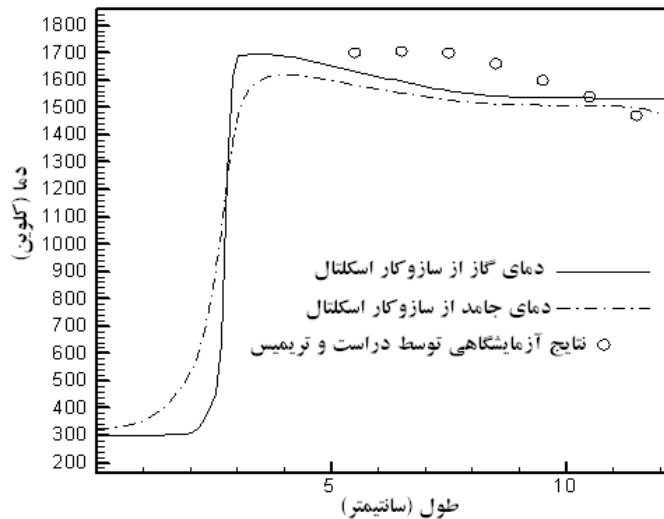
در کار حاضر، احتراق پیش آمیخته هوا-متان در کوره متخلخل دو قسمتی مطالعه شده است. ویژگی‌های ترموفیزیکی، ترموشیمیایی و نرخ پیشرفت واکنش توسط زیربرنامه TRANFIT [۱۵] و برنامه CHEMKIN II و اطلاعات پایه آن به دست آمده است. برای شبیه‌سازی فرایند احتراق از چهار سینتیک چند مرحله‌ای متفاوت استفاده شده که این چهار سازوکار عبارت‌اند از: سازوکار اسکلتال (Skeletal) [۱۶]، سازوکار GRI-2.11، سازوکار GRI-3.0 [۱۷] و سازوکاری متشکل از ۱۷ گونه و ۵۸ واکنش. توزیع دما و اجزای جرمی به دست آمده توسط این چهار سازوکار با هم مقایسه شده‌اند. برای بررسی حساسیت توزیع دمای مخلوط گاز و ماتریس جامد و انتشار آلاینده‌ها اثرات تغییر در ضریب هدایت گرمایی مطالعه شده است. نتایج به دست آمده با نتایج تحقیقات مالیکو [۱۰] مطابقت خوبی دارد که این موضوع در شکل (۲) نشان داده شده است.



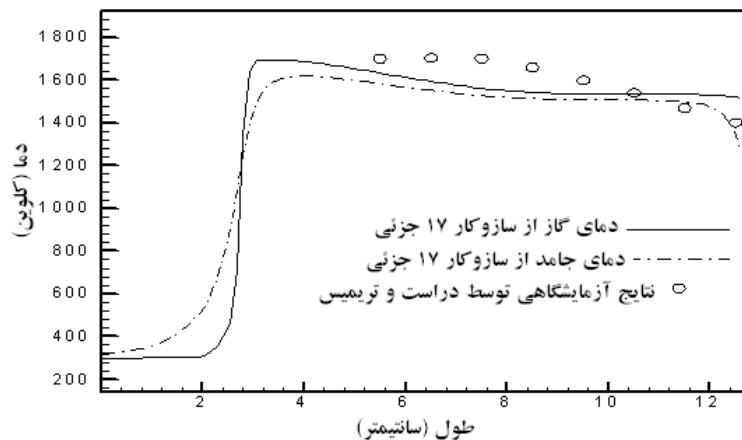
شکل ۲- (a) توزیع دمای گاز به دست آمده از تحقیقات مالیکو و همکاران با نسبت هوای اضافی ۱/۵ [۱۰]، (b) توزیع دمای گاز به دست آمده از حل عددی با نسبت هوای اضافی ۱/۵

در شکل‌های (۳) تا (۶)، توزیع دمای گاز به دست آمده با استفاده از سازوکارهای مطالعه شده در این مقاله با نتایج تجربی به دست آمده توسط ترمیمس و دارست برای کوره‌ای با توان 5 Kw/m^2 و با نسبت هوای اضافی $1/5$ مقایسه شده است [۱۸]. دلیل تفاوت بین نتایج عددی و تجربی می‌تواند ناشی از تفاوت و یا عدم دقت بعضی از ویژگی‌های ماده متخلخل مانند هدایت گرمایی، ضریب انتقال گرمای حجمی و ویژگی‌های تشعشعی باشد. هر گونه تغییر در این ویژگی‌ها منجر به تغییرات شدید در نتیجه نهایی می‌شود. از آنجا که این ویژگی‌ها از طریق کارهای آزمایشگاهی به دست می‌آیند و با توجه به ساختار پیچیده مواد متخلخل و عملیات مکانیکی مختلف، تعیین این ویژگی‌ها بسیار پیچیده و غیر دقیق است. همان‌طور که انتظار می‌رود در ناحیه پیش گرمایش، دمای ماتریس جامد به دلیل انتقال گرمای هدایتی و تشعشع بیشتر از دمای گاز است و در ناحیه احتراق، دمای سیال بیشتر از دمای ماده متخلخل است که این موضوع شدیداً تحت تاثیر ضریب انتقال گرمای همرفت و هدایت است که در قسمت‌های بعدی توضیح داده خواهد شد.

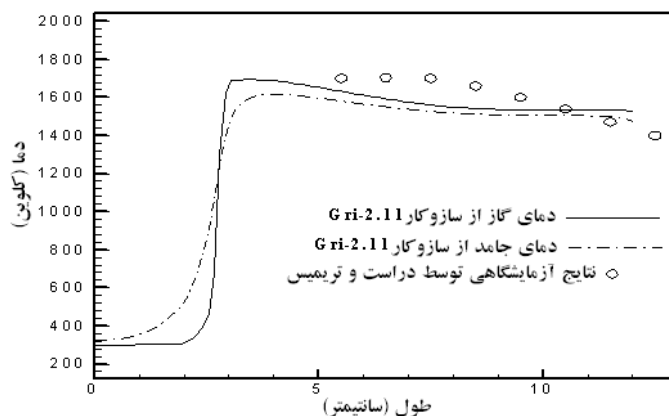
نتایج حاصل از شبکه‌هایی با تعداد گره‌های 65×7 و 130×13 و 260×26 بررسی شد. در نهایت نتایج بهتر و درست‌تر با شبکه‌ای متشکل از کمترین وابستگی به تعداد شبکه را نشان دادند و بعد از این مرحله با ریزتر شدن شبکه تغییر چندانی در نتایج به دست آمده مشاهده نشد. بنابراین تحقیق حاضر با شبکه متشکل از 300×26 ادامه داده شد.



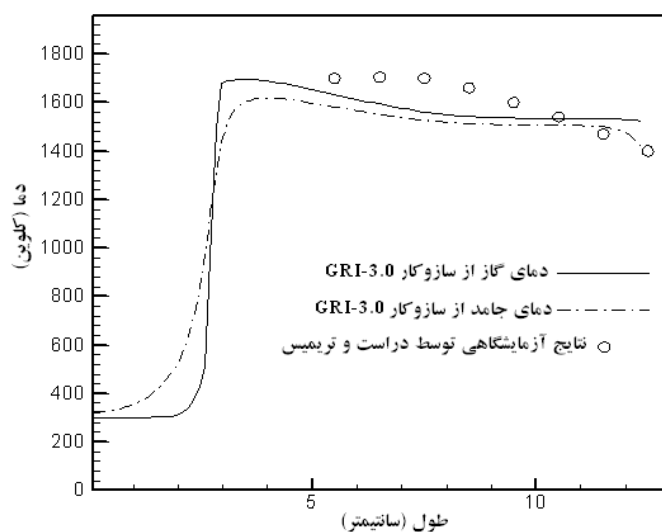
شکل ۳- مقایسه توزیع دمای به دست آمده از سازوکار اسکالنال با نتایج تجربی در مشعل متخلخل با نسبت هوای اضافی $1/5$ [۱۸]



شکل ۴- مقایسه توزیع دمای به دست آمده از سازوکاری متشکل از ۱۷ گونه با نتایج تجربی در مشعل متخلخل با نسبت هوای اضافی $1/5$ [۱۸]

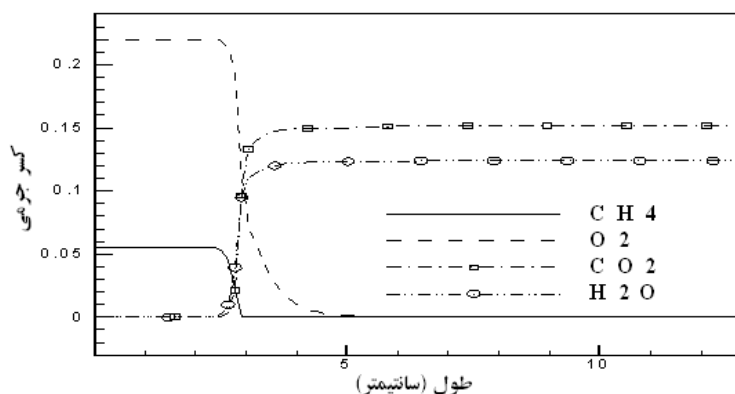


شکل ۵- مقایسه توزیع دمای به دست آمده از سازوکار Gri-2.11 با نتایج تجربی در مشعل متخلخل با نسبت هوای اضافی ۱/۵ [۱۸]



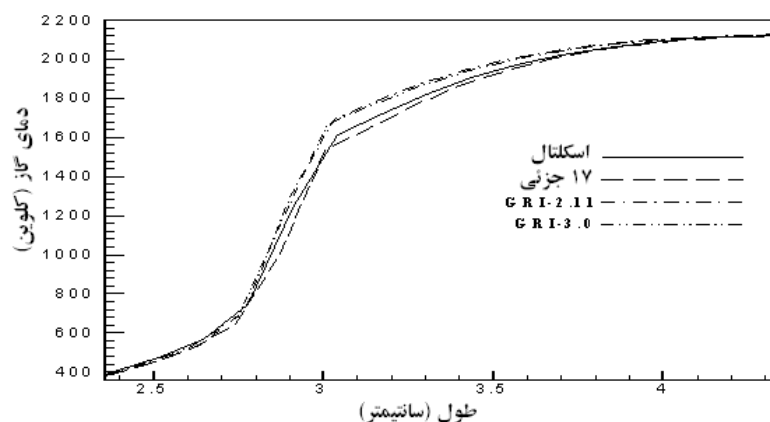
شکل ۶- مقایسه توزیع دمای به دست آمده از سازوکار Gri-3.0 با نتایج تجربی در مشعل متخلخل با نسبت هوای اضافی ۱/۵ [۱۸]

در شکل (۷)، کسر جرمی گونه‌های شیمیایی اصلی بر روی خط مرکزی کوره با استفاده از سازوکار اسکلتال و در حالت استوکیومتریک، نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود اکسیژن و متان که جزء واکنش دهنده‌ها هستند، از مقدار اولیه خود در ابتدای واکنش به مقدار تقریباً صفر در انتهای واکنش احتراق رسیده‌اند و همچنین دی اکسید کربن و آب که جزء فراورده‌های واکنش هستند از مقدار صفر در ابتدای واکنش، به یک مقدار تعادلی در انتهای واکنش رسیده‌اند.



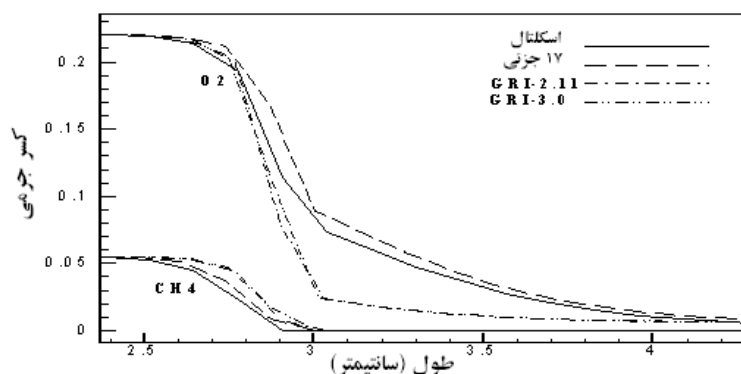
شکل ۷- توزیع جزء جرمی گونه‌های شیمیایی اصلی در حالت استوکیومتریک

همان‌طور که قبلاً ذکر شد، در این مقاله برای مدل‌سازی واکنش‌های شیمیایی از چهار سازوکار احتراق در حالت دو بعدی استفاده شده است. شکل (۸) توزیع دمای مخلوط گاز به دست آمده توسط چهار سازوکار احتراقی متفاوت را نشان می‌دهد.

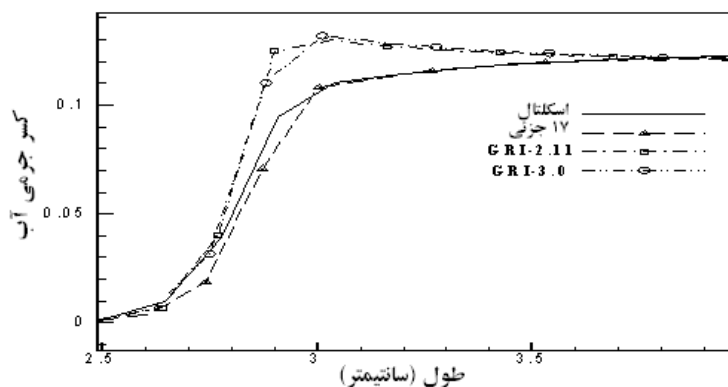


شکل ۸- توزیع دمای گاز به دست آمده از چهار سازوکار متفاوت در حالت استوکیومتریکی و در حالت بزرگنمایی

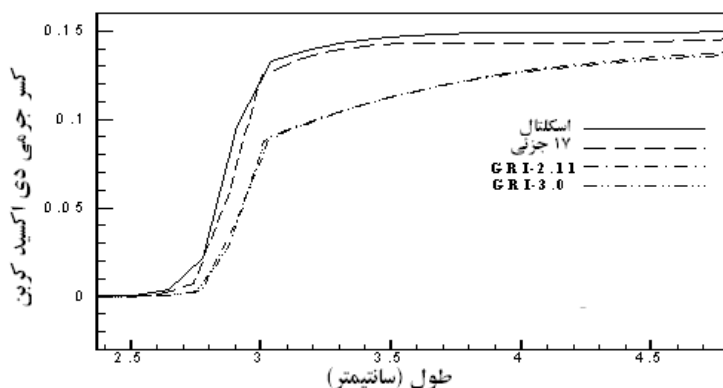
شکل‌های (۹) و (۱۰) و (۱۱) توزیع کسر جرمی گونه‌های شیمیایی اصلی را با استفاده از چهار سازوکار احتراقی متفاوت نشان می‌دهند. به نظر می‌رسد که دو سازوکار GRI 2.11 و GRI.3 دقت تقریباً یکسان در پیش‌بینی انتشار آلاینده‌ها و توزیع دمای مخلوط گاز و ماتریس جامدند. همچنین همان‌طور که از شکل‌ها مشخص است نتایج حاصل از سازوکار اسکلتال و سازوکار شامل ۱۷ گونه خیلی نزدیک به هم هستند.



شکل ۹- توزیع جزء جرمی گونه‌های شیمیایی اصلی با استفاده از چهار سازوکار متفاوت در حالت استوکیومتریکی و در حالت بزرگنمایی

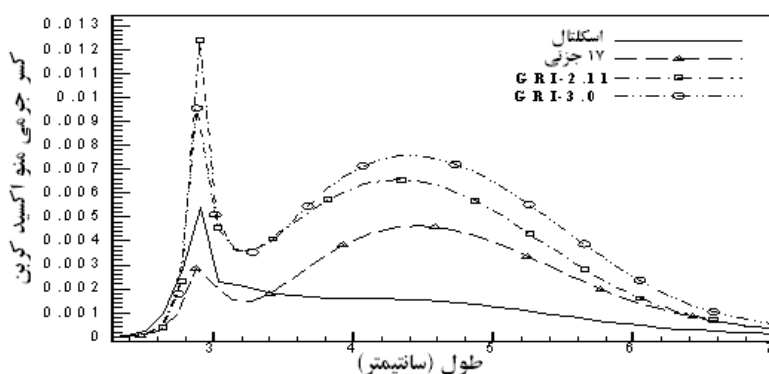


شکل ۱۰- توزیع جزء جرمی H_2O با استفاده از چهار سازوکار متفاوت در حالت استوکیومتریکی و در حالت بزرگنمایی

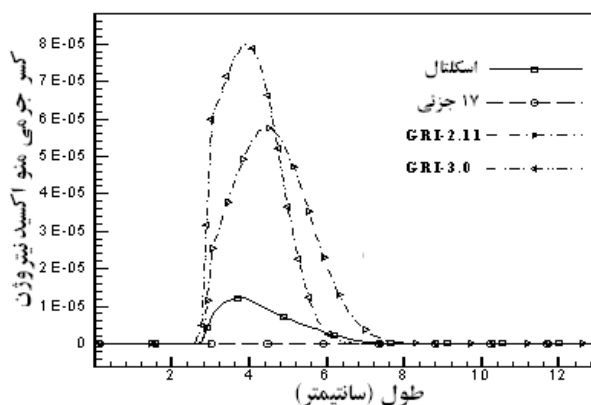


شکل ۱۱- توزیع جزء جرمی دی اکسید کربن با استفاده از چهار سازوکار متفاوت در حالت استوکیومتریکی و در حالت بزرگنمایی

در شکل (۱۲) میزان انتشار مونوکسید کربن با استفاده از چهار سازوکار احتراقی نشان داده شده است. همان طور که در این شکل دیده می شود میزان مونوکسید کربن پیش بینی شده با استفاده از سازوکارهای GRI-2.11 و GRI-3.0 بیشتر از دو سازوکار دیگر است. البته میزان مونوکسید کربن خروجی از کوره پیش بینی شده توسط همه سازوکارها در حالت کلی تفاوت بسیار کمی دارد. در شکل (۱۳)، میزان انتشار NO با استفاده از چهار سازوکار احتراقی نشان داده شده است. همان طور که در این شکل دیده می شود، همانند توزیع کسر جرمی مونوکسید کربن، میزان انتشار NO پیش بینی شده با استفاده از سازوکارهای GRI-2.11 و GRI-3.0 بیشتر از دو سازوکار دیگر است و به دلیل این که سازوکار شامل ۱۷ گونه شیمیایی شامل گونه NO نیست، این سازوکار میزان انتشار NO را صفر نشان می دهد.

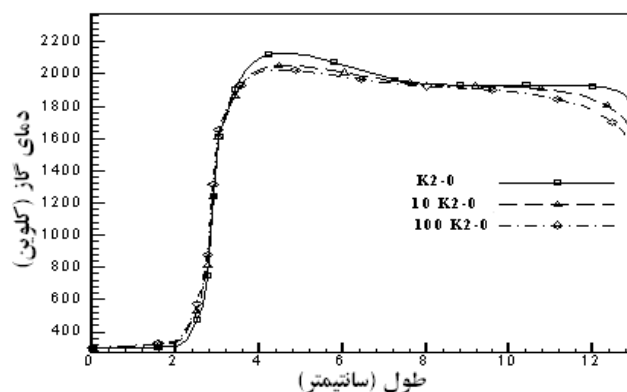


شکل ۱۲- میزان انتشار مونوکسید کربن با استفاده از چهار سازوکار متفاوت در حالت استوکیومتریکی و در حالت بزرگنمایی

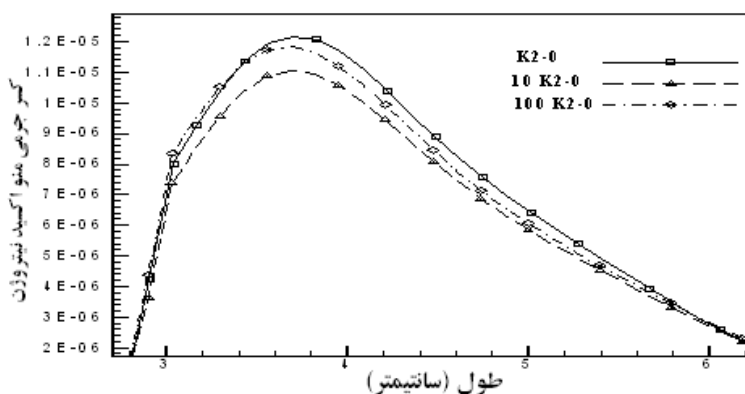


شکل ۱۳- میزان انتشار NO با استفاده از چهار سازوکار متفاوت در حالت استوکیومتریکی و در حالت بزرگنمایی

در این قسمت با ثابت نگه داشتن ضریب هدایت گرمایی در بالادست، ضریب هدایت گرمایی در پایین دست تغییر داده شده و اثرات آن بر روی توزیع دما و انتشار آلاینده‌ها بررسی شده است. شکل (۱۴) توزیع دمای گاز را برای مقادیر مختلف هدایت گرمایی در پایین دست نشان می‌دهد. همان‌طوری که دیده می‌شود با افزایش هدایت گرمایی در پایین دست (با ثابت نگه داشتن آن در بالادست) دمای گاز در پایین دست کاهش و در بالا دست افزایش می‌یابد. این امر را می‌توان این‌گونه توجیه کرد که با افزایش هدایت گرمایی در پایین دست گرمای بیشتری از ماتریس جامد به بالادست انتقال می‌یابد که در نتیجه باعث کاهش دما در پایین دست و افزایش دما در بالادست می‌شود و همچنین باعث می‌شود مخلوط گاز ورودی بیشتر گرم شود. مسلماً با کاهش دما در ناحیه احتراق انتشار آلاینده‌ها نیز کاهش پیدا خواهد کرد. در شکل (۱۵) میزان انتشار NO برای مقادیر مختلف هدایت گرمایی در پایین دست کوره نشان داده شده است.



شکل ۱۴- توزیع دمای گاز برای مقادیر مختلف هدایت گرمایی در پایین دست در حالت استوکیومتریک



شکل ۱۵- میزان انتشار NO در حالت بزرگنمایی برای مقادیر مختلف هدایت گرمایی در پایین دست در حالت استوکیومتریک

نتیجه‌گیری

به طور خلاصه نتایج به دست آمده از این مقاله به شرح زیر هستند:

- نتایج به دست آمده از هر چهار سازوکار تطابق خوبی با نتایج تجربی دارند.
- سازوکار GRI 2.11 تطابق بسیار خوبی با سازوکار GRI-3.0 نشان می‌دهد. بنابراین می‌توان از سازوکار GRI-2.11 به دلیل هزینه و زمان کمتر به جای سازوکار GRI-3.0 استفاده کرد. همچنین سازوکار اسکلتال و سازوکار متشکل از ۱۷ گونه دارای دقت تقریباً یکسان در پیش‌بینی توزیع دما و محصولات احتراقی هستند.
- با افزایش ضریب انتقال گرمایی در پایین دست و ثابت نگه داشتن آن در بالادست، دمای گاز و ماده متخلخل در ناحیه احتراق کاهش و در ناحیه پیش گرمایش افزایش می‌یابد. کاهش دما در ناحیه احتراق موجب کاهش انتشار آلاینده‌ها می‌شود.

مراجع

1. Yoshizawa, Y., Sasaki, K., and Echigo, R. "Analytical Study of the Structure of Radiation Controlled Flame," *Int. J. Heat Mass Transfer*, 31, pp. 311-319, 1988.
2. Zhou, X. Y., and Pereira, J. C. F., "Numerical Study of Combustion and Pollutions Formation in Inert Non Homogenous Porous Media," *Combustion Science Technology*, 130, pp. 335-364, 1997.
3. Tseng, C., "Effects of Hydrogen Addition on Methane Combustion in a Porous Medium Burner," *International Journal of Hydrogen Energy*, 27, pp. 699-707, 2002.
4. Barra, A. J., Diepvens, G., Ellzey, J. L., and Henneke, M. R., "Numerical of the Effect of Material Properties on Flame Stabilization in a Porous Burner," *Combustion and Flame*, 134, pp. 369-379, 2003.
5. S. Hossainpour, and B. Haddadi, "Numerical Study of the Effects of Porous Burner Parameters on Combustion and Pollutant Formations," *World Congress on Engineering, WCE 2008, London, U.K.*, pp. 1505-1510, July, 2008.
6. Mohamad, A. A., Ramadhyani, S., and Viskanta, R. "Modeling of Combustion and Heat Transfer in a Packed Bed with Embedded Coolant Tubes," *Int. J. Heat Mass Transfer*, 37, pp. 1181-1191, 1994.
7. Bidi, M., Saffar Avval, M., and Heyrani Nobari, M., "A Two-Dimensional Numerical Study of Combustion in Porous Media," *Eurotherm Seminar N° 81 Reactive Heat Transfer in Porous Media*, 2007.
8. Farzaneh, M., Ebrahimi, R., Shams, M., and Shafiey, M., "Two-Dimensional Numerical Simulation of Combustion and Heat Transfer in Porous Burners," *Engineering letters*, 15, No. 2, EL_15_2_28, 2007.
9. Kee, R. J., Miller, J. A., and Jefferson, T. H., *CHEMKIN: A General Purpose Problem Independent, Transportable, Fortran, Chemical Kinetic Program Package*, Sandia National Lab. Report, SAND80-8003, 1996.
10. Malico, I., Zhou, X. Y., and Pereira, J. C. F., "Two-Dimensional Numerical Study on Combustion and Pollutants Formation in Porous Burner," *Combust. Sci. and Tech*, 152, pp. 57-59, 2000.
11. Vafai, K., *Handbook of Porous Media*, Taylor & Francis Group, LIC, 2005.
12. Nemoda, S., Trimis, D., and Zivkovich, G., "Numerical Simulation of Porous Burners and Hole Plate Surface Burners," 8, No. 1, pp. 3-17, 2004.
13. Kee, R. J., Rupley, F. M., and Miller, J. A., *The Chemkin Thermodynamic Data Base*. Sandia National Laboratories, Rept. SAND-8215B, 1992.
14. Brown, P. N., Byrne, G. D., and Hindmarsh, A. C., "VODE: a Variable Coefficient ODE Solver," *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 10, pp. 1038-1051, 1989.
15. Kee, R. J., Dixon-LEWIS, G., Warnatz, J., Coltrin, M. E., and Miler, J. A., "A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas Phase Multi-component Transport Properties," *Sandia National Lab. Report SAND 86-8246*, 1996.
16. P. Glarborg, N. I. Lilleheie, S. Byggstoyl, B. F. Magnussen, P. Kilpinen, and M. Hupa, "A Reduced Mechanism for Nitrogen Chemistry in Methane Combustion," 24th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, 24, No. 1, pp. 889-89, 1992.
17. G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song, W. C. Gardiner Jr., V. Lissianski, and Z. Qin, available at: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech
18. F. Durst, and D. Trimis, "Compact Porous Medium Burner and Heat Transfer Exchanger for Household Applications," EC project report, Contact no. JOEC-CT95-0019, 1996.

English Abstract

Two-Dimensional Numerical Simulation of Combustion in Porous Burners using for Multi-Steps Kinetics Mechanisms

S. Hossainpour and N. Moallemi Khiavi

Department of Mechanical Engineering, Sahand University of Technology

This work reports a two-dimensional numerical modeling of premixed methane/air combustion in porous media. To this end, a Fortran code with CHEMKIN II is used along with its database. This code solves the Navier-Stokes, the solid and gas energy and the chemical species transport equations using finite volume method. The pressure and velocity are coupled with the SIMPLE algorithm. The burner under study is a rectangular one with two different regions: the first region is a preheating zone (low porosity), and the second region is a combustion zone (high porosity). The importance of this work is due to its use of multi-step kinetics for simulating chemical reactions. In addition, the effects of changes in conduction coefficient on temperature profiles, chemical species mass fractions and pollutant emissions are investigated. It has been shown that by increasing conduction coefficient in the downstream of flame, gas and solid temperature will decrease in this zone resulting reduction in pollutant formation. Also predictions using these four different chemical mechanisms correspond to each other.

Keywords: Combustion, Porous media burner, Finite volume method, Multi-step mechanism, Heat transfer