

بررسی عددی تشکیل دوده در احتراق هیدروکربن سنگین پیش تبخیر شده، در یک شعله نفوذی

حامد زینی وند^{۱*}، عرفان حسینی دوست^۲، سجاد رضایت^۳، حسین بهادری^۴

۱- معاونت پژوهش و فناوری، شرکت مینا بویلر، تهران، ایران، Hamed.Zeinivand@mapnabe.com

۲- معاونت پژوهش و فناوری، شرکت مینا بویلر، تهران، ایران، erfana.hoseinidoost@Mapnabe.com

۳- معاونت پژوهش و فناوری، شرکت مینا بویلر، تهران، ایران، Sajjad.Rezayat@Mapnabe.com

۴- معاونت پژوهش و فناوری، شرکت مینا بویلر، تهران، ایران، hosssein.bahadori@Mapnabe.com

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۱/۱۴، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۴۰۳/۰۴/۲۷، پذیرش: ۱۴۰۳/۰۵/۱۳)

چکیده: در مقاله حاضر نسبت به بررسی و مدل سازی تشکیل دوده در یک محفظه احتراق با سوخت کروسین پیش بخار شده و هوا اقدام شده است. برای مدل سازی احتراق فاز گازی از مدل فلیملت به همراه مکانیزم Jet-Surf.1 استفاده شده است. مواد پیش رو تشکیل دهنده دوده C_6H_5 ، C_6H_6 ، C_2H_4 ، C_2H_2 در نظر گرفته شده است. نتایج حاصل از شبیه سازی عددی با نتایج تجربی موجود تطابق مناسبی را نشان می دهد. با بررسی مدل های مختلف تشکیل دوده نشان داده شده است مدل ی موس-بروکس-هال که برای هیدروکربن های سنگین توسعه داده شده است نسبت به دیگر مدل های پیش بینی دوده عملکرد بهتری را نشان می دهد. مدل بروکس-هال نسبت به مدل بروکس-هال-موس مقدار تولید دوده را کمتر پیش بینی می کند با این حال نسبت به مدل های تک و دو معادله ای نتایج بهتری ارائه می دهد. همچنین نشان داده شده است که با افزایش دمای هوای احتراق میزان تشکیل دوده نیز افزایش یافته است.

کلیدواژگان: تشکیل دوده، مدل سازی احتراق، جریان واکنشی، مدل موس-بروک-هال، مدل فلیملت

مقدمه

بحث آلاینده های هوا در سال های اخیر یک موضوع کلیدی در مباحث مربوط به صنایع است. بسیاری از صنایع تلاش می کنند تا میزان تولید آلاینده های خود را کاهش دهند. پیش بینی میزان تولید آلاینده ها در سیستم های احتراقی یکی از موارد مهم در طراحی سیستم های احتراقی مانند مشعل ها، کوره ها، بویلرها، توربین ها و ... است. آلاینده هایی مانند ذرات معلق، NOx، دوده و ... می تواند با بهبود کیفیت احتراق به طرز قابل توجهی کاهش یابد. یکی از الزامات کاهش این آلاینده ها پیش بینی دقیق و مناسب و همچنین شناخت مکانیزم های تولید آن ها است [۱]. شبیه سازی عددی یکی از ابزارهای مناسب در این جهت است. تشکیل دوده یکی از پیچیده ترین فرآیندهای فیزیکی و شیمیایی است که در هنگام احتراق رخ می دهد. در سوخت های هیدروکربنی با نسبت کربن به هیدروژن بالا تشکیل دوده یک موضوع جدی است. از طرفی مدل های توسعه داده شده در این خصوص همچنان نیاز به توسعه بیشتری دارد. اکثریت قریب به اتفاق کاربردهای احتراق صنعتی در مقیاس بزرگ، از شعله های غیرمخلوط از جمله در موتورهای توربین گازی، کوره ها و موتورهای دیزلی در خودروها استفاده می کنند. دما در چنین سیستم هایی بین ۱۵۰۰ تا ۲۵۰۰ کلین است و به طور کلی اکسیژن کافی برای احتراق سوخت وجود دارد. مقدار کل دوده تشکیل شده در این شرایط معمولاً در مقایسه با مقدار کربن موجود در سوخت مصرفی بسیار ناچیز است. در این شرایط زمان

موجود برای تشکیل دوده در حد چند میلی‌ثانیه است. از آنجایی که نسبت هم ارزی موضعی در شعله غیرمخلوط شده متفاوت است، تمایل به تشکیل دوده می‌تواند تغییر کند. نسبت هم ارزی پایین می‌تواند به ذرات دوده اجازه دهد که بدون مصرف اکسیژن از شعله عبور کنند. حتی اگر تمام دوده تشکیل شده در شعله به CO اکسید شود، کاهش نسبت هم ارزی موضعی ممکن است از اکسیداسیون کامل به CO₂ جلوگیری کند و باعث انتشار گازهای خروجی با دوده بالا شود.

حجم وسیعی از مراجع علمی در مورد مکانیزم‌های شیمیایی تشکیل دوده در شعله‌های غیرمخلوط وجود دارد. تشکیل دوده همان‌طور که در شکل (۱) نمایش داده شده است، در چهار مرحله اصلی رخ می‌دهد: (۱) تشکیل ذرات دوده، (۲) رشد سطحی، (۳) انعقاد/تجمع و (۴) اکسیداسیون [۲]. رشد دوده همزمان با انعقاد و تجمع رخ می‌دهد. انعقاد فرآیندی است که طی آن ذرات کوچک به هم می‌پیوندند و ذرات اولیه بزرگ‌تر را تشکیل می‌دهند و تراکم فرآیندی است که طی آن چندین ذره اولیه پشت سر هم قرار می‌گیرند تا ساختارهای بزرگ‌تری شبیه به رشته‌ای از مروراید تشکیل دهند. ذرات دوده را می‌توان به سمت جلوی شعله منتقل کرد، جایی که آن‌ها از یک منطقه اکسیداسیون عبور می‌کنند که در آن جرم دوده کاهش می‌یابد.

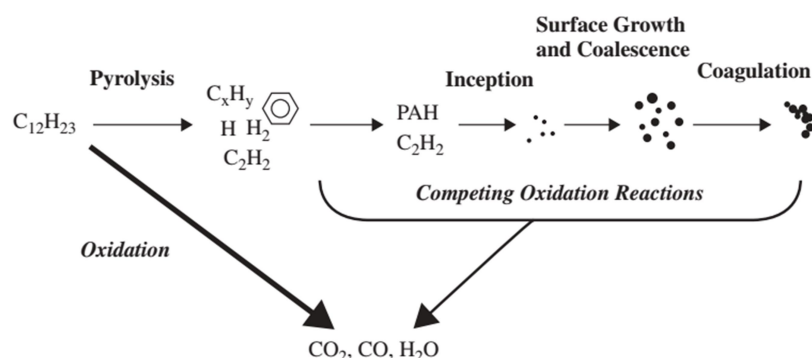


Figure 1- Mechanisms and process of Soot Formation for C₁₂H₂₃

شکل ۱- مکانیزم و روند تشکیل دوده در سوخت کروسین [۳]

اگرچه پیش‌بینی‌های قابل قبولی در حوزه شعله‌های دیفیوژنی آرام انجام شده است [۴]، با این حال در حالت احتراق آشفته سوخت‌های هیدروکربنی سنگین مانند دیزل و کروسین، شرایط پیچیده می‌شود و مدل‌ها دچار خطای زیادی می‌شوند و مدل‌هایی که برای احتراق هیدروکربن‌های ساده مانند متان توسعه یافته‌اند کارایی لازم را ندارند. تشکیل دوده در شعله متان- هوا عموماً از اجزا کوچک مانند استیلن و تشکیل هیدروکربن‌های پلی آروماتیک (PAH) از آن‌ها انجام می‌شود. در سوخت‌های سنگین مانند کروسین، دارای ترکیبات آروماتیک هستند که فرآیند تشکیل دوده را به طرز قابل توجهی سرعت می‌بخشند [۵]. جهت شبیه‌سازی احتراق در بسیاری از سیستم‌های صنعتی، مدل‌های بر اساس کسر مخلوط و براساس PDF مانند فلیملت با توجه به دقت مطلوب و زمان محاسبات قابل قبول بسیار پر استفاده می‌باشند. اما این مدل‌ها به دلیل فرضیات حاکم بر آن‌ها قابل استفاده در پیش‌بینی آلاینده‌هایی مانند دوده و NOx نمی‌باشند.

مدل‌های اولیه تجربی پیش‌بینی دوده، کسر حجمی دوده را با متغیرهای معینی از میدان شعله مانند دما و یا سوخت نسوخته باقی مانده، مرتبط می‌کردند [۶]. بر اساس این مدل‌ها، مدل‌های نیمه تجربی توسعه پیدا کرد که اثرات فیزیکی بیشتری را در نظر می‌گرفتند. مدل‌های اولیه بر اساس متغیرهای ساده‌تری بودند که به دلیل اینکه برای شرایط خاصی ضرایب استخراج می‌شد دامنه کاربرد گسترده‌ای نداشتند. به همین دلیل متغیرهای بیشتری بر اساس فیزیک و شیمی دقیق‌تر تشکیل دوده به کار گرفته شد. هیدروکربن‌های پلی سایکلیک آروماتیک (PAH) به عنوان یکی از اصلی‌ترین عوامل پایه‌ای تشکیل دوده

شناخته شده و بر این اساس مکانیزم کاهش هیدروژن و افزودن کربن (HACA) توسعه داده شد [۷]. امروزه این رویکرد، پایه بیشتر مدل‌های توسعه داده شده در پیش‌بینی دوده است [۸-۱۰].

به صورت کلی سه نوع رویکرد را در مدل‌سازی دوده در مراجع می‌توان مشاهده کرد. ۱- متد ممان‌ها (MOM)، ۲- رویکرد انتخابی و ۳- مدل‌های دو معادله‌ای. در رویکرد ممان‌ها، توزیع ابعاد ذرات (PSD) به وسیله ممان‌های از پیش تعریف شده تخمین زده می‌شود [۱۱]. این متد، روشی کارآمد اما با مشکلات زیادی در اجرای عددی است. در متد رویکرد انتخابی، نواحی مشخصی از PSD انتخاب می‌شوند و در این روش امکان اعمال مکانیزم تجمع دوده نیز وجود دارد. مدل‌های دو معادله‌ای به لحاظ هزینه محاسبات مقرون به صرفه‌تر می‌باشند.

در حوزه مدل‌های چند معادله‌ای، برای مدل‌سازی دوده، مدل‌های تجربی و نیمه تجربی زیادی توسعه داده شده است که از آن جمله می‌توان به مدل تک معادله‌ای پیشنهاد شده توسط خان و گریوس [۱۲]، مدل‌های دو معادله‌ای پیشنهاد شده توسط تسنر و همکارانش [۱۳] و بروکس و همکارانش [۱۴]. مدل‌های دو معادله‌ای توسعه داده شده توسط بروکز بعدها توسط ون و همکارانش برای هیدروکربن‌های سنگین‌تر توسعه داده شد [۱۵]. در سال‌های اخیر مطالعات زیادی در حوزه مدل‌سازی دوده و همچنین فیزیکی حاکم بر تشکیل دوده انجام شده است [۱۶-۱۹].

تمام مدل‌های دو معادله‌ای مقادیر ثابتی را برای بازه گسترده‌ای از سوخت‌ها و همچنین شرایط عملکردی در نظر می‌گیرند. این مقادیر ثابت مدل‌ها در ابتدا برای احتراق متان-هوا استخراج شده‌اند و سپس با فرمولاسیون مشابه برای هیدروکربن‌های دیگر مورد استفاده قرار گرفته‌اند. سوخت‌های هیدروکربنی سنگین‌تر در صنایع، کاربرد زیادی دارند و به همین دلیل شبیه‌سازی و تحلیل دوده در آن‌ها بسیار مهم است. در مطالعه حاضر تولید دوده هیدروکربن سنگین با چند مدل تشکیل دوده و مهم‌تر از مدل موس-بروک-هال شبیه‌سازی و مقایسه شده است. این شبیه‌سازی‌ها با داده‌های تجربی یونگ و همکارانش [۲۰] مقایسه شده است.

معادلات حاکم

مدل‌سازی آشفنگی

برای شبیه‌سازی جریان آشفته داخل محفظه احتراق از مدل آشفته k-e بهینه شده استفاده شده است تا جریان داخلی را به خوبی مدل‌سازی کند. در مدل فوق ترم تنش‌های رینولدز به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود [۲۱].

$$\overline{\rho u_i' u_j'} = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{\rho k} \quad (1)$$

که در رابطه فوق μ_t ویسکوزیته آشفنگی است و به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود.

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2)$$

که در این رابطه C_μ برابر ۰/۰۹ در نظر گرفته شده است. علاوه بر این معادلات انتقال انرژی جنبشی آشفنگی و نرخ اضمحلال انرژی جنبشی به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} k \tilde{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mu_t S^2 - \bar{\rho} \varepsilon \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \varepsilon \tilde{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t S^2 - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (4)$$

مقادیر ثابت معادلات فوق در مرجع [۲۱] ارائه شده است. همچنین لازم به ذکر است که مقادیر شارهای حرارتی و اجزایی آشفته‌گی به صورت زیر حل می‌شود که بر اساس فرض انتقال گرادیان است.

$$\bar{\rho} \widetilde{h_s'' u_i''} = - \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}_s}{\partial x_i} \quad (5)$$

$$\bar{\rho} \widetilde{Y_k'' u_i''} = - \frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (6)$$

برهمکنش احتراق و آشفته‌گی

برای شبیه‌سازی برهمکنش احتراق و آشفته‌گی از مدل پایای شعله آرام فلیملت^۱ استفاده شده است [۲۲]. در این مدل فرض می‌شود که شعله به صورت مجموعه‌ای از شعله‌های آرام کوچک در داخل جریان آشفته قرار دارد. فرض این مدل بر اساس احتراق سریع است و با اسکالر نرخ اضمحلال اثرات کرنش شعله را نیز در نظر می‌گیرد. این فرض برای بسیاری از شعله‌های دیفیوژنی فرض مناسبی است. البته باید در نظر گرفت که مدل در نظر گرفته شده در اینجا با فرض عدد لویس ۱ است که با توجه به نوع سوخت که کروسین است فرض مناسبی است. با فرض عدد لویس ۱ معادلات مربوط به انرژی و اجزا به صورت زیر می‌شود:

$$0 = \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} + \frac{\omega_i}{\rho} \quad (7)$$

$$0 = \frac{\chi}{2} \frac{1}{C_p} \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} - \frac{\chi}{2} \frac{1}{C_p} \sum_{k=1}^N h_k \frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho C_p} \sum_{k=1}^N h_k \omega_k \quad (8)$$

ارتباط بین فضای فیزیکی و فضای کسر مخلوط با استفاده از پارامتر نرخ اضمحلال اسکالر که به صورت زیر تعریف می‌شود ایجاد می‌شود.

$$\chi = 2D \left| \frac{\partial z}{\partial x_j} \right|^2 \quad (9)$$

همچنین روند تغییرات نرخ اضمحلال اسکالر به صورت زیر تعریف می‌شود.

¹ The Steady Laminar Flamelet (SLFM)

$$\chi(z) = \chi_{st} \exp \left[2 \left(\operatorname{erf}^{-1}(2z_{st}) \right)^2 - 2 \left(\operatorname{erf}^{-1}(2z) \right)^2 \right] \quad (10)$$

در نهایت بر اساس مقادیر حاصل از شعله متقابل آرام و انتگرال گیری با تابع احتمال کسر مخلوط و نرخ اضمحلال اسکالر مقادیر آشفته ترمودینامیکی و اجزایی به صورت زیر محاسبه می شود.

$$\bar{\rho} \bar{Y}_k = \int_0^{+\infty} \int_0^1 \rho Y_k(z, \chi_{st}) p(z, \chi_{st}) dz d\chi_{st} \quad (11)$$

$$\bar{\rho} \bar{T} = \int_0^{+\infty} \int_0^1 \rho T(z, \chi_{st}) p(z, \chi_{st}) dz d\chi_{st} \quad (12)$$

در این روابط $p(z, \chi_{st})$ تابع احتمال پیوسته است که به صورت زیر تعریف می شود.

$$p(z, \chi_{st}) = p(z)p(\chi_{st}) \quad (13)$$

$$p(z) = \frac{1}{B(a, b)} z^{a-1} (1-z)^{b-1} = \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} z^{a-1} (1-z)^{b-1} \quad (14)$$

$$a = \bar{z} \left[\frac{\bar{z}(1-\bar{z})}{\bar{z}''^2} - 1 \right] \quad b = \frac{a}{\bar{z}} - a \quad (15)$$

تابع احتمال دانسیته در نظر گرفته شده برای مدل سازی حاضر تابع بتا^۱ است که بر اساس کسر مخلوط و با روابط زیر تولید می شود. در رابطه بالا مقادیر Z و Z'' در هر نقطه توسط روابط انتقال زیر محاسبه می شود.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{z}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \bar{z}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_i} - \bar{\rho} \tilde{u}_i'' z'' \right) \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \bar{z}''^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \bar{z}''^2) \\ = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i'' z''^2)}_{\text{Transport}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \bar{z}''^2}{\partial x_i} \right)}_{\text{Molecular Diffusion}} + \underbrace{2z'' \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_i} \right)}_{\text{Production}} - \underbrace{2\rho u_i'' z'' \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_i}}_{\text{Dissipation}} \end{aligned} \quad (17)$$

برای تابع احتمال مربوط به نرخ اضمحلال اسکالر از تابع لاگ-نرمال استفاده می شود که به صورت زیر است.

^۱ Beta Function

$$p(\chi_{st}) = \frac{1}{\chi_{st}\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\ln\chi_{st} - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (18)$$

که در آن χ_{st} بیان کننده نرخ اضمحلال اسکالر استوکیومتری است به صورت زیر نوشته می شود

$$\bar{\chi}_{st} = \int_0^{+\infty} \chi_{st} p(\chi_{st}) d\chi_{st} = \exp\left(\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right) \quad (19)$$

مدل سازی دوده

مدل های یک و دو معادله ای

تمام مدل های مربوط به مدل سازی دوده که به صورت دومرحله ای می باشند دو معادله انتقال را در نظر می گیرند. یک معادله انتقال برای کسر جرمی Y_{soot} و معادله انتقال دوم برای غلظت هسته های دوده: در شرایطی که از مدل تک معادله ای خان و گرویس [۱۲] استفاده شود تنها معادله انتقال (۲۰) مورد استفاده قرار می گیرد. تنسردلی بر اساس کسر جرمی دوده و همچنین هسته ذرات ارائه داده است که دو معادله ای است [۱۳] و علاوه بر معادله انتقال (۲۰) از معادله انتقال (۲۱) نیز استفاده می کند هر دو مدل یک معادله ای و دو معادله ای به صورت نیمه تجربی می باشند. نرخ واکنش به صورت ضرایب مربوط به مگنسن در نظر گرفته می شود. این نرخ واکنش به گونه ای در نظر گرفته می شود که هم تولید و هم مصرف دوده و هسته ذرات در نظر گرفته می شود.

$$\frac{\partial(\rho Y_{soot})}{\partial x} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} Y_{soot}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_{soot}} Y_{soot} \right) + R_{soot} \quad (20)$$

$$\frac{\partial(\rho b^*_{nuc})}{\partial x} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} b^*_{nuc}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_{nuc}} b^*_{nuc} \right) + R^*_{nuc} \quad (21)$$

در رابطه فوق b^*_{nuc} غلظت نرمال شده هسته های رادیکال است. هسته های رادیکال نقش مهمی در مراحل اولیه تشکیل دوده دارند. در طول پیدایش دوده، این هسته ها در رشد نانوذرات کربنی از هیدروکربن های فاز گاز نقش دارند. با ادامه این فرآیند، این نانوذرات خوشه می شوند و ذرات دوده بزرگ تری را تشکیل می دهند.
 σ_{nuc} عدد پراوتل آشفته برای انتقال هسته ها است. همچنین R^*_{nuc} نرخ نرمال شده تولید هسته ها است (تعداد ذرات ضربدر $10^{-15}/m^3-s$).

برای حالت تک معادله ای R_{soot} از رابطه زیر محاسبه می شود. مقدار نرخ تشکیل و همچنین احتراق در مرجع [۱۳] آورده شده است.

$$R_{soot} = R_{soot,form} - R_{soot,comb} \quad (22)$$

برای حالت دو معادله ای نرخ تشکیل بر اساس غلظت رادیکال هسته ها محاسبه می شود.

$$R_{soot,form} = m_p(\alpha - \beta N_{soot})c_{nuc} \quad (23)$$

که در آن m_p جرم میانگین ذرات دوده و c_{nuc} غلظت هسته رادیکال ها است.

مدل موس- بروک

مدل پیشنهادی موس-بروک بر اساس حل دو معادله انتقال عمل می‌کند [۱۴]. این دو معادله شامل معادله انتقال برای غلظت نرمالیزه شده رادیکال‌های هسته دوده b_{nuc} و همچنین کسر جرمی دوده Y_{soot} است.

$$\frac{\partial(\rho Y_{soot})}{\partial x} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} Y_{soot}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_{soot}} Y_{soot} \right) + \frac{dM}{dt} \quad (24)$$

$$\frac{\partial(\rho b_{nuc}^*)}{\partial x} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} b_{nuc}^*) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_{nuc}} b_{nuc}^* \right) + \frac{1}{N_{norm}} \frac{dN}{dt} \quad (25)$$

که در آن

Y_{soot} کسر جرمی دوده

M غلظت جرمی دوده

b_{nuc}^* غلظت نرمال شده هسته رادیکال‌ها

N چگالی تعداد ذرات دوده (تعداد ذرات در مترمکعب)

N_{norm} برابر است با 10^{15} ذره

$\frac{\mu_t}{\sigma_{soot}}$ ضریب نفوذ برای کسر جرمی دوده

$\frac{\mu_t}{\sigma_{nuc}}$ ضریب نفوذ برای هسته رادیکال‌های دوده

است.

قسمت‌های مربوط به $\frac{dM}{dt}$ و $\frac{dN}{dt}$ به صورت زیر محاسبه می‌شوند.

نرخ لحظه‌ای ذرات دوده، حاصل از تولید هسته‌ها از فاز گازی و سپس تجمیع آن‌ها در یک رژیم مولکولی آزاد به صورت رابطه زیر نوشته می‌شود.

$$\frac{dN}{dt} = \underbrace{C_\alpha N_A \left(\frac{X_{prec} P}{RT} \right)^l \exp \left\{ -\frac{T_\alpha}{T} \right\}}_{\text{Nucleation}} - \underbrace{C_\beta \left(\frac{24RT}{\rho_{soot} N_A} \right)^{1/2} d_p^{1/2} N^2}_{\text{Coagulation}} \quad (26)$$

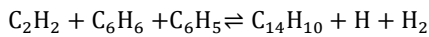
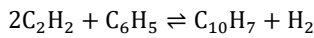
که در آن C_α و C_β و 1 ضرایب ثابت مدل می‌باشند. همچنین $N_A = 6.02205 \times 10^{26}$ بر روی کیلومول است (عدد آووگادرو) و X_{prec} کسر مولی پیش‌ساخته دوده است. برای کروسین ذرات پیش‌ساخته دوده، استیلن و بنزن در نظر گرفته می‌شود. چگالی دوده ۱۸۰۰ کیلوگرم بر مترمکعب در نظر گرفته شده است و d_p قطر متوسط ذرات دوده در نظر گرفته شده است. همچنین ترم چشمه مربوط به غلظت دوده توسط رابطه زیر توصیف می‌شود.

$$\frac{dM}{dt} = \underbrace{M_P C_\alpha \left(\frac{X_{prec} P}{RT} \right)^l \exp \left\{ -\frac{T_\alpha}{T} \right\}}_{\text{Nucleation}} + \underbrace{C_\gamma \left(\frac{X_{sgs} P}{RT} \right)^m \exp \left\{ -\frac{T_\gamma}{T} \right\} \left[(\pi N)^{1/3} \left(\frac{6M}{\rho_{soot}} \right)^{2/3} \right]^n}_{\text{Coagulation}} - \underbrace{C_{oxid} C_\omega \eta_{coll} \left(\frac{X_{OH} P}{RT} \right) \sqrt{T} (\pi N)^{1/3} \left(\frac{6M}{\rho_{soot}} \right)^{2/3}}_{\text{Oxidation}} \quad (27)$$

که در آن C_ω ، C_{oxid} ، C_α و m و n اعداد ثابت می‌باشند. عدد ثابت Mp برابر ۱۴۴ کیلوگرم بر کیلومول است که در واقع جرم یک ذره پیش‌ساخته دوده است (در اینجا برابر ۱۲ اتم کربن در نظر گرفته شده است). X_{sgS} کسر مولی اجزائی است که در رشد سطحی مشارکت دارند. توضیحات بیشتر در خصوص معادلات فوق در مرجع [۲۳، ۱۴] آورده شده است.

مدل موس-بروک-هال

مدل موس-بروک برای شعله متان توسعه داده شده است. بعدها توسط هال [۲۴] یک توسعه‌ای در این مدل صورت گرفت که برای هیدروکربن‌های سنگین‌تر قابلیت بیشتری پیدا کرد. این تغییر بر اساس تشکیل دوده و آروماتیک‌های دو و سه حلقه‌ای از استیلن و بنزن بر اساس روابط زیر است.



(۲۸)

برای برهمکنش بین آشفستگی و واکنش

برای برهمکنش سینتیک و آشفستگی در فرآیند تشکیل دوده، از روش متغیرهای کوپل شده تابع احتمال دانسیته (PDF) استفاده شده است. در شبیه‌سازی حاضر از دو متغیر دمای نرمال شده و کسر مخلوط استفاده شده است.

مدل‌سازی انتقال حرارت تشعشی

معادله انتقال حرارت تشعشی به صورت یک معادله انتگرالی دیفرانسیلی است که مدل‌سازی آن با چالش‌های فراوانی روبرو است. در این حالت طبق معادله (۲۹) ترم‌های مربوط به جذب، انتشار و همچنین پراکنش بیرونی و درونی ظاهر می‌شوند که در یک محیط با گازهای احتراق این ترم‌ها همگی تأثیر قابل توجهی دارند.

$$\frac{dI(r,s)}{ds} = -(a + \sigma_s)I(r,s) + an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(r,s') \Phi(s,s') d\Omega' \quad (29)$$

در مقاله حاضر، اثر انتقال حرارت تشعشی با استفاده از مدل DO و با تقریب S4 اعمال شده است [۲۵]. به این صورت که معادله انتقال حرارت تشعشی در جهات مختلف و با اعمال ضریب وزنی هر جهت مدل‌سازی می‌شود. با استفاده از تقریب S4 هر یک از زوایای فضایی به ۴ قسمت تقسیم می‌شود و در نتیجه در مجموع ۱۶ صفحه فضایی خواهیم داشت. برای اثر تغییرات دما، فشار و اجزاء از مدل WSSG¹ استفاده شده است و در نتیجه فرض گاز خاکستری بر حل حاکم است و از اثر طول موج در انتقال حرارت تشعشی صرف‌نظر شده است.

در شرایطی که مدل‌سازی دوده در محفظه احتراق در نظر گرفته می‌شود، با توجه به اینکه دوده دارای خواص تشعشی بسیار تأثیرگذار است و همچنین شرایط جسم سیاه را دارد می‌بایست اثرات تشعشی آن در نظر گرفته شود. در این حالت با توجه به متفاوت بودن خواص تشعشی دوده با مخلوط گازهای احتراقی ضریب جذب گازها به صورت ترکیب دوده و گازهای احتراقی دیگر در نظر گرفته می‌شود.

$$a_{s+g} = a_g + a_s \quad (30)$$

¹ Weighted-Sum-of-Gray-Gases-Model

در این رابطه ترم مربوط به a_g ضریب جذب گاز بدون دوده است که همان طور که در بالا اشاره شد، از رابطه WSGGM به دست می‌آید. فرض پایه‌ای در مدل WSGGM این است که انتشار کل در فاصله s می‌تواند از رابطه زیر محاسبه شود.

$$\varepsilon = \sum_{i=0}^I a_{\varepsilon,i}(T)(1 - e^{-\kappa_i p s}) \quad (31)$$

که در رابطه فوق، $a_{\varepsilon,i}$ ضریب وزنی انتشار برای جز i ام گاز خاکستری است. κ_i ضریب جذب کسر گاز است. همچنین p فشار جزئی گازها است. همچنین ترم جذب دوده از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$a_s = b_1 \rho_g Y_{soot} [1 + b_T (T - 2000)] \quad (32)$$

که در آن

$$\begin{aligned} b_1 &= 1232.4 \text{ m}^2/\text{kg} \\ b_T &\approx 4.8 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1} \end{aligned} \quad (33)$$

می‌باشند.

هندسه و شرایط مرزی

در مقاله حاضر، از مطالعات تجربی یونگ و همکارانش [۲۰] استفاده شده است. از نرم‌افزار ANSYS-FLUENT به منظور شبیه‌سازی جریان، احتراق، تشعشع و شبیه‌سازی دوده استفاده شده است. به منظور شبیه‌سازی عددی از یک هندسه دوبعدی متقارن محوری استفاده شده است (شکل (۲)). سوخت از یک ورودی با قطر ۱/۵ میلی‌متر وارد محفظه احتراق می‌شود. محفظه احتراق دارای قطر ۱۵۰ میلی‌متر و طول ۶۰۰ میلی‌متر است. سوخت مایع کروژین در ابتدا بخار شده و سپس بخار آن از نازل سوخت وارد محفظه احتراق می‌شود. سوخت در این‌جا به صورت $C_{10}H_{22}$ در نظر گرفته می‌شود. سوخت ورودی دارای دمای ۵۹۸ کلوین و سرعت ۲۲/۲۸ متر بر ثانیه است. هوا از طریق یک ورودی حلقوی اطراف سوخت با سرعت ۰/۲۳۴ متر بر ثانیه و دمای ۲۸۸ کلوین وارد محفظه احتراق می‌شود. فشار محفظه طبق داده‌های تجربی ۱ اتمسفر در نظر گرفته شده است.

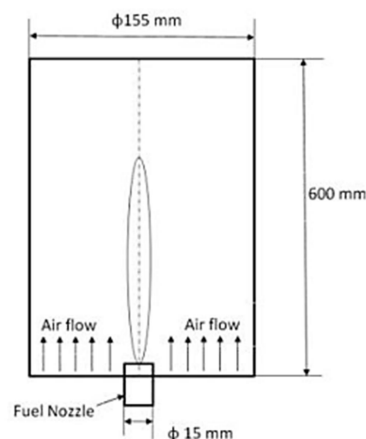


Figure 2- Schematic of Combustion Chamber
شکل ۲- طرح‌واره مربوط به هندسه محفظه احتراق

به منظور تولید مدل فلیملت پایا، می‌بایست مکانیزم شیمیایی جزئی به کار گرفته شود. در کار حاضر مدل JetSurf. 1 شامل ۱۹۴ جزء و ۱۴۵۹ واکنش شیمیایی است مورد استفاده قرار گرفته است [۲۶]. از مدل فلیملت چندگانه استفاده شده تا نرخ کرنش‌های بالا ایجاد شوند. مقدار نرخ کرنش از شرایط تعادل شروع می‌شود و در نهایت به نقطه خاموشی شعله ختم می‌شود. تمام دیواره با دمای ثابت در نظر گرفته شده‌اند. برای مدل‌سازی دوده موارد زیر در نظر گرفته شده است. جرم هسته اولیه تشکیل دوده $144(\text{kg/kmol})$ در نظر گرفته شده است و چگالی ذرات دوده نیز $200(\text{kg/m}^3)$ فرض شده است. اجزا اصلی تشکیل دهنده اولیه دوده به صورت C_2H_2 ، C_2H_4 ، C_6H_6 برای مدل موس-بروک و همچنین اضافه شدن H_2 و C_6H_5 برای مدل موس-بروکس-هال [۲۷] در نظر گرفته شده است. زیر-مدل اکسیداسیون دوده نیز لی [۲۸] در نظر گرفته شده است.

بررسی استقلال از شبکه

در نمودار (۳) مقایسه‌ای بین توزیع محوری کسر حجمی دوده برای شبکه‌های مختلف از کمترین (حدود ۶۰ هزار سلول محاسباتی) تا بیشترین (حدود ۱ میلیون سلول محاسباتی) نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود افزایش قابل توجه تعداد سلول‌های محاسباتی تأثیر عمده‌ای در پیش‌بینی توزیع دوده نداشته است و در نتیجه نشان می‌دهد حل عددی حاضر استقلال کافی از شبکه را دارا است.

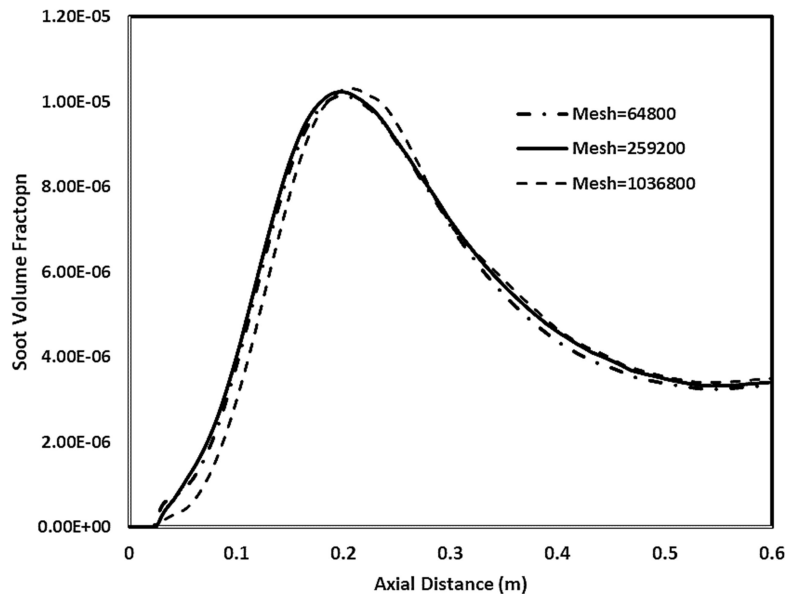


Figure 3- Grid Independence for Soot Volume Fraction
شکل ۳- بررسی استقلال شبکه برای کسر حجمی دوده

بحث بر روی نتایج

در شکل (۴) مقایسه‌ای بین کسر مخلوط محوری محفظه احتراق برای شبیه‌سازی حاضر و داده‌های تجربی موجود ارائه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود شبیه‌سازی عددی تطابق مناسبی با داده‌های تجربی نشان می‌دهد که بیان‌کننده پیش‌بینی مناسب اختلاط سوخت و اکسنده در محفظه احتراق است.

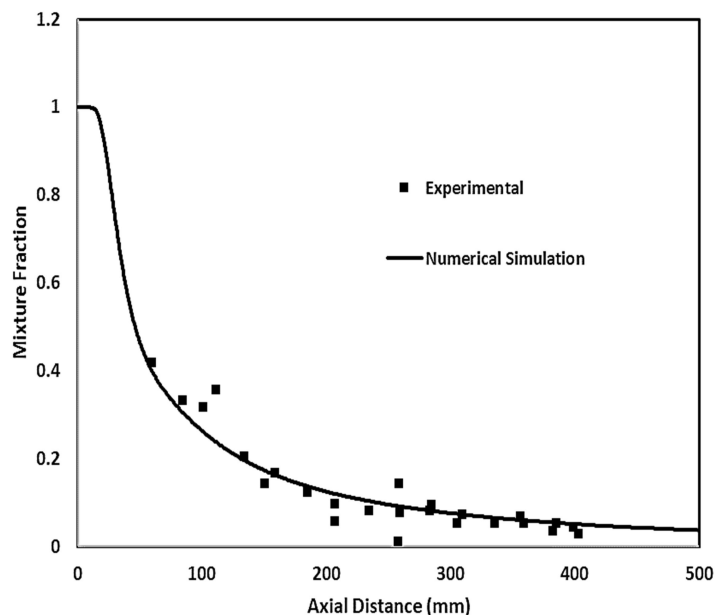


Figure 4- Mixture Fraction Numerical Simulation and Experiments in Axial distance
 شکل ۴- کسر مخلوط بر روی محور برای شبیه‌سازی عددی و نتایج تجربی

در شکل (۵) کانتور دمای محفظه احتراق نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، دمای شعله در مرکز بیشینه می‌شود و در ادامه با باز شدن جریان و انتقال حرارت بیشتر، دمای شعله کاهش می‌یابد.

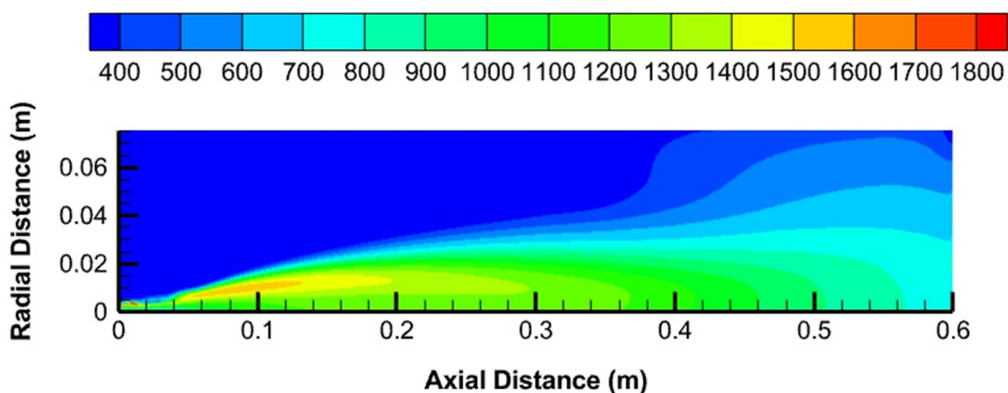


Figure 5- Contour of Temperature Distribution
 شکل ۵- کانتور توزیع دما در محفظه احتراق

در شکل (۶) مقایسه‌ای بین دمای شعاعی محفظه احتراق برای نتایج عددی و داده‌های تجربی در فاصله ۱۰۰ میلی‌متری از ورودی محفظه انجام شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در قسمت مرکزی تطابق کاملی بین نتایج شبیه‌سازی و داده‌های تجربی وجود دارد. با این حال در ناحیه لایه برشی بین سوخت و هوا داده‌های تجربی و شبیه‌سازی عددی دارای اختلاف قابل توجهی می‌باشند. مقدار بیشینه دمای پیش‌بینی شده در حدود ۱۱ درصد با مقدار تجربی فاصله دارد. همچنین به لحاظ موقعیت شعاعی میزان بیشینه ۴۵ درصد با داده تجربی اختلاف دارد.

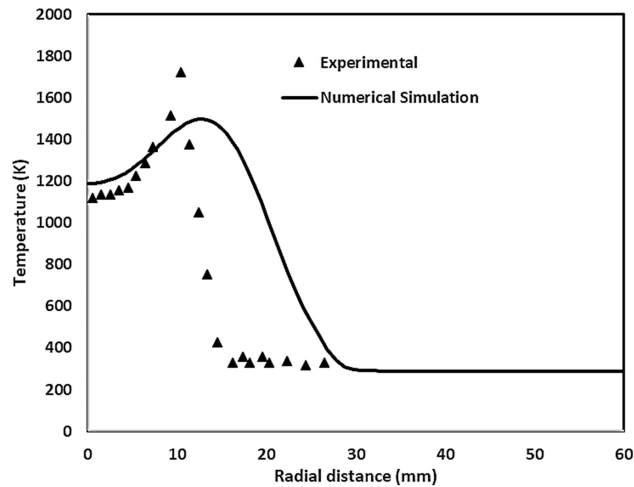


Figure 6- Radial Temperature of Combustion Chamber for Axial Distance of 100 mm
شکل ۶- دمای شعاعی محفظه برای فاصله ۱۰۰ میلی متری از ورودی

در شکل (۷) مقایسه‌ای بین دمای شعاعی محفظه احتراق برای نتایج عددی و داده‌های تجربی در فاصله ۳۰۰ میلی متری از ورودی محفظه انجام شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در قسمت مرکزی اختلافی در حدود ۲۰۰ درجه بین نتایج تجربی و داده‌های عددی وجود دارد و این مقدار به صورت معکوس در پس از لایه برشی وجود دارد. با این حال محدوده و رفتار کلی پیش‌بینی شده است.

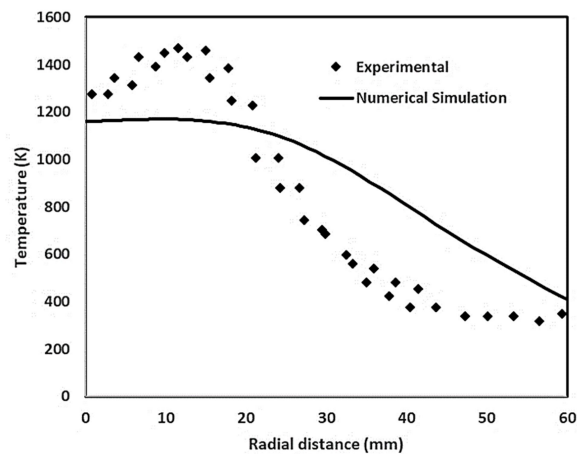


Figure 7- Radial Temperature of Combustion Chamber for Axial Distance of 300 mm
شکل ۷- دمای شعاعی محفظه برای فاصله ۳۰۰ میلی متری از ورودی

در شکل (۸) مقایسه‌ای بین نتایج عددی حاصل از شبیه‌سازی دوده با مدل موس-بروکس-هال و داده‌های تجربی بر روی محور محفظه احتراق نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود اگرچه ناحیه مربوط به بیشینه دوده تولید شده در حدود ۱۰۰ میلی متر زودتر پیش‌بینی شده است، با این حال مقدار بیشینه در شبیه‌سازی عددی با مدل موس-بروکس-هال تطابق بسیار مناسبی نشان می‌دهد و این مدل توانسته مقدار بیشینه و روند تولید دوده را به خوبی برای این شعله پیش‌بینی کند. میزان بیشینه کسر مولی دوده پیش‌بینی شده توسط مدل موس بروک هال در حدود ۷ درصد با داده تجربی اختلاف دارد. موقعیت طولی بیشینه کسر مولی نیز در حدود ۵۰ درصد با داده تجربی اختلاف دارد.

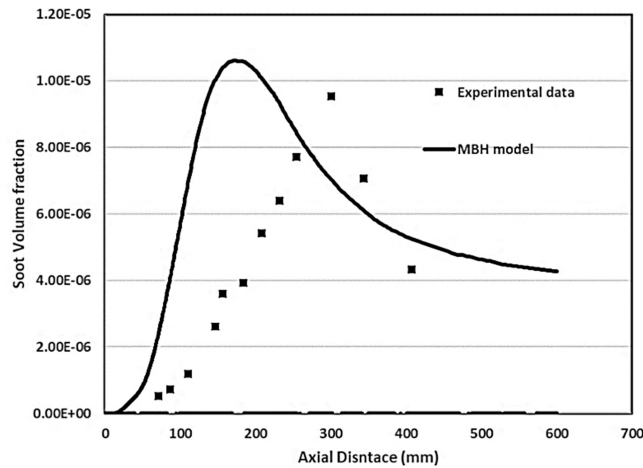


Figure 8- Soot Volume Fraction in Axial Distance

شکل ۸- کسر حجمی دوده بر روی محور محفظه برای نتایج تجربی و شبیه‌سازی عددی

در شکل (۹) مقایسه‌ای بین کسر حجمی دوده به صورت شعاعی در محفظه احتراق برای نتایج عددی و داده‌های تجربی در فاصله ۱۰۰ میلی‌متری از ورودی محفظه انجام شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود به لحاظ مقیاس نتایج تجربی و عددی همسان می‌باشند و همچنین روند نمودارها مشابهت دارد با این حال به لحاظ مقدار دقیق، نتایج شبیه‌سازی در حدود ۵۰ درصد بیش از داده‌های تجربی است که با توجه به پیچیدگی‌های شبیه‌سازی تشکیل دوده نسبتاً مطلوب است.

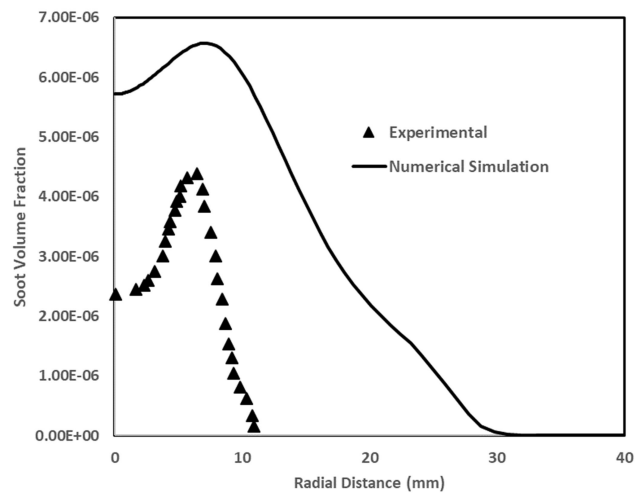


Figure 9- Soot Volume Fraction for Axial Distance of 100 mm

شکل ۹- کسر حجمی دوده شعاعی برای مقادیر تجربی و شبیه‌سازی عددی در فاصله ۱۰۰ میلی‌متری از ورودی

در شکل (۱۰) مقایسه‌ای بین کسر حجمی دوده به صورت شعاعی در محفظه احتراق برای نتایج عددی و داده‌های تجربی در فاصله ۳۰۰ میلی‌متری از ورودی محفظه انجام شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود به لحاظ مقیاس نتایج تجربی و عددی همسان می‌باشند.

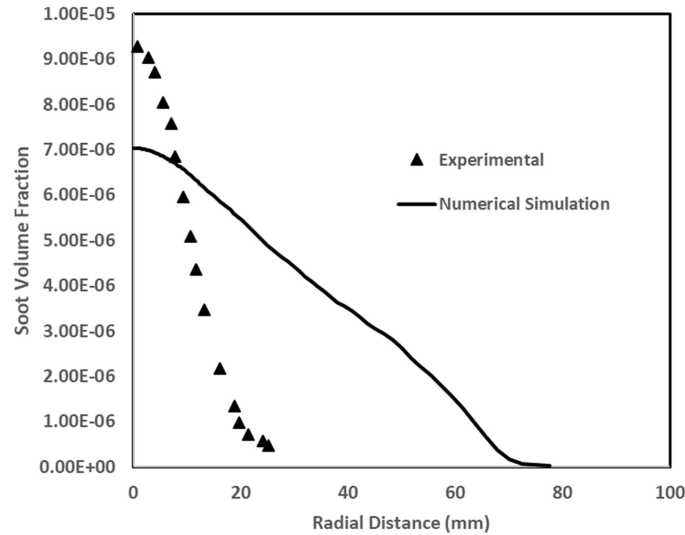


Figure 10- Soot Volume Fraction for Axial Distance of 300 mm

شکل ۱۰- کسر حجمی دوده شعاعی برای مقادیر تجربی و شبیه‌سازی عددی در فاصله ۳۰۰ میلی‌متری از ورودی

در شکل (۱۱) مقایسه‌ای بین کسر حجمی دوده بر روی خط محوری محفظه احتراق برای مدل‌های مختلف تشکیل دوده ارائه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود به لحاظ مقدار بیشینه تشکیل دوده مدل موس-بروک-هال که برای هیدروکربن‌های سنگین توسعه داده شده است، از تمام مدل‌ها پیش‌بینی دقیق‌تری داشته است. با این حال همچنان که پیش از این اشاره شد موقعیت بیشینه تشکیل دوده به‌صورت کاملاً دقیق پیش‌بینی نشده است. مدل موس-بروکس در تخمین میزان بیشینه و موقعیت آن دارای خطای بیشتری است. در حالی که خطای مدل موس-بروک-هال با داده تجربی در بیشینه حدود ۷ درصد است، اختلاف مدل موس-بروک در حدود ۳۰ درصد است. مدل‌های تک و دو معادله‌ای در پیش‌بینی بیشینه تشکیل دوده دارای خطای بسیاری زیادی می‌باشند و مقدار بیشینه تشکیل دوده در حدود 10^{-12} است که بسیار با مقادیر تجربی و همچنین نتایج شبیه‌سازی مدل موس-بروکس و موس-بروکس-هال فاصله دارد.

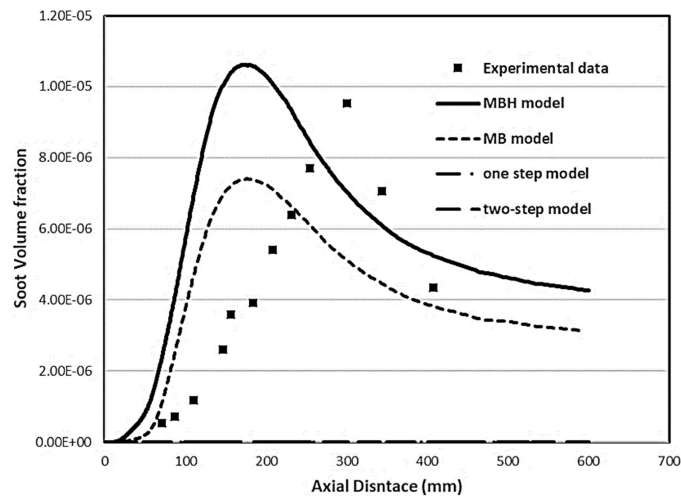


Figure 11- Soot Volume Fraction of Axial Distance for $x=100$ mm

شکل ۱۱- کسر حجمی دوده بر روی محور محفظه برای مدل‌های مختلف تشکیل دوده

در شکل (۱۲) اثرات افزایش دمای هوای ورودی به محفظه احتراق در کسر حجمی محوری تشکیل دوده نشان داده شده است. لازم به ذکر است نمودار فوق مربوط به مدل موس-بروک-هال است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با افزایش دمای هوای ورودی به عبارت دیگر پیش‌گرم شدن بیشتر هوا، میزان تشکیل دوده نیز افزایش یافته است. در شرایط احتراق پیش‌آمیخته، سرعت و حجم تشکیل دوده توسط یک مکانیزم رقابتی تعیین می‌شود. در این مکانیزم رقابتی پیرولیز سوخت در یک طرف قرار و همچنین حمله اکسیدکننده‌ها به ساختارهای پیش تشکیل شده دوده در سمت دیگر (مکانیزم مصرف و از بین رفتن دوده) قرار دارد. در این شعله‌ها با افزایش دما سرعت برخورد و حمله اکسند به ساختارهای پیش تشکیل شده دوده بیشتر از نرخ پیرولیز افزایش می‌یابد و در نتیجه پیک تشکیل دوده و سرعت تشکیل آن کاهش می‌یابد. به عبارت دیگر در شعله‌های پیش‌آمیخته، با افزایش دما، تمایل به تشکیل دوده کاهش می‌یابد.

اما در شعله‌های دیفیوژنی (مانند شعله حاضر)، دوده در قسمت سوخت تشکیل می‌شود و اکسیژنی در آن قسمت برای حمله به ساختارهای پیش‌ساخته وجود ندارد و در نتیجه مکانیزم رقابتی شکل نمی‌گیرد. به همین دلیل با افزایش دمای شعله و واکنش‌دهنده‌ها، نرخ پیرولیز سوخت افزایش می‌یابد و در نتیجه حجم دوده تشکیل شده نیز افزایش می‌یابد.

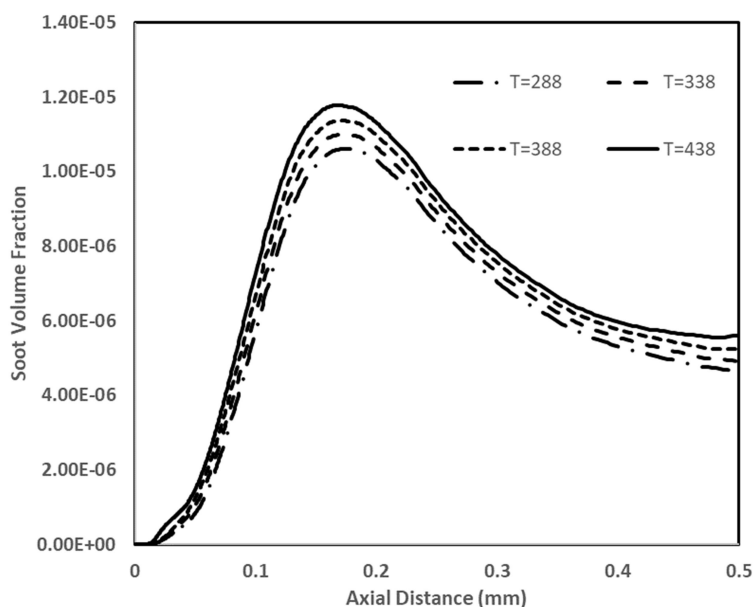


Figure 12- Soot Volume Fraction of Axial Distance for Various Air Inlet Temperature
 شکل ۱۲- کسر حجمی دوده بر روی محور محفظه برای دمای ورودی‌های مختلف هوا

در شکل (۱۳) اثرات افزایش دمای هوای ورودی به تشکیل هسته‌های اولیه دوده نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش دما هسته‌های دوده بیشتری در فاصله محوری بیشتر از ۱۰۰ میلی‌متری شکل گرفته است. همچنین مشاهده می‌شود که با افزایش بیشتر دما از ۴۳۸ کلونین رفتار تشکیل هسته‌ها به‌صورت کامل تغییر کرده است.

در شکل (۱۴) مقایسه‌ای بین کسر جرمی C_2H_2 به عنوان یکی از پیش ساختارهای مهم تولید دوده برای دو مدل موس-بروک و موس-بروک-هال نمایش داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود اختلاف قابل توجهی بین مقدار استیلین تولید شده برای دو مدل وجود ندارد. در واقع مقدار این پیش‌ساخته دوده تأثیر اصلی را در اختلاف پیش‌بینی بین دو مدل ندارد. در شکل (۱۵) مقایسه‌ای بین نرخ گسترش سطح هسته‌های دوده برای دو مدل نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده

می‌شود در این حالت اختلاف قابل توجهی بین دو مدل وجود دارد. مقدار بیشینه نرخ گسترش سطح هسته‌های دوده برای مدل موس-بروک-هال در حدود دو برابر مدل موس-بروک است. تفاوت قابل توجه بین دو مدل در واقع در پیش‌بینی نرخ گسترش سطوح، تجمع هسته‌ها و همچنین اکسید شدن آن‌ها است که در مدل موس-بروک-هال این مقادیر برای هیدروکربن‌های سنگین بهینه شده است.

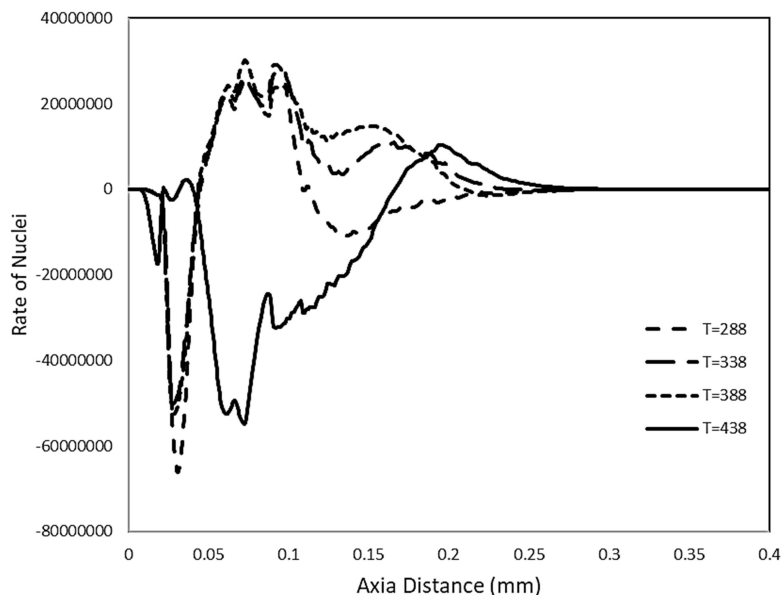


Figure 13- Rate of Nuclei of Axial Distance for Various Air Inlet Temperature
 شکل ۱۳- مقایسه بین نرخ تشکیل هسته‌های دوده بر روی محور برای دمای مختلف هوای ورودی

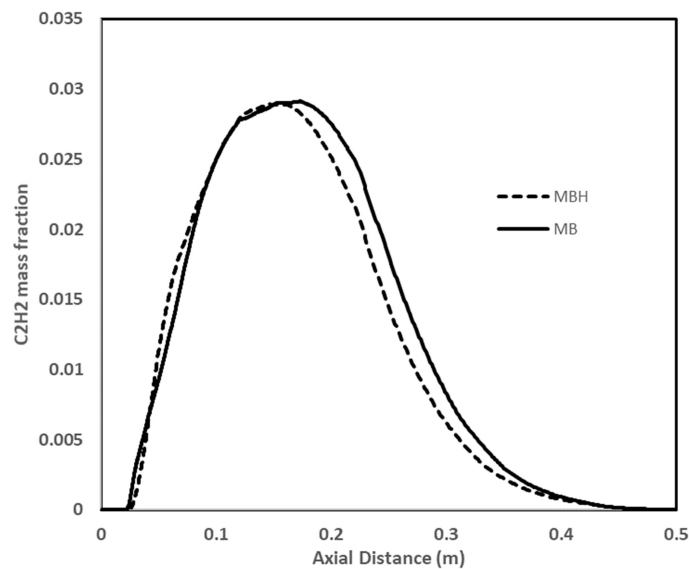


Figure 14- Mass fraction of C_2H_2 in axial distance for MB and MBH models
 شکل ۱۴- مقایسه بین نرخ تشکیل استیلن برای دو مدل MB و MBH بر روی محور طولی محفظه

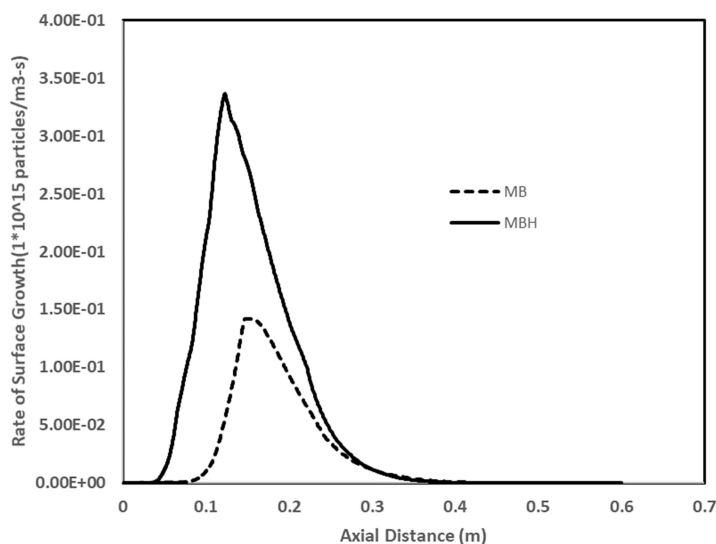


Figure 15- Rate of Surface Growth in Axial Distance for MB and MBH Models
 شکل ۱۵- مقایسه بین نرخ رشد سطح هسته‌ها بر روی محور طولی برای دو مدل MB و MBH

نتیجه‌گیری

در مقاله حاضر مدل‌سازی عددی تشکیل دوده در یک شعله غیرنفوذی با سوخت کروزین پیش‌تبخیر شده و هوا مورد بررسی قرار گرفته است. برای مدل‌سازی احتراق فاز گازی از مدل فلیملت به همراه مکانیزم Jet-Surf.1 استفاده شده است. مواد پیش‌رو تشکیل‌دهنده دوده C_6H_5 ، C_6H_6 ، C_2H_4 ، C_2H_2 در نظر گرفته شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی عددی با نتایج تجربی موجود تطابق مناسبی را نشان می‌دهد. با بررسی مدل‌های مختلف تشکیل دوده نشان داده شده است مدل ی-موس-بورکس-هال که برای هیدروکربن‌های سنگین توسعه داده شده نسبت به دیگر مدل‌های پیش‌بینی دوده عملکرد بهتری را نشان می‌دهد. مدل بروکس-هال نسبت به مدل بروکس-هال-موس مقدار تولید دوده را کمتر پیش‌بینی می‌کند با این حال نسبت به مدل‌های تک و دو معادله‌ای نتایج بهتری ارائه می‌دهد. مدل‌های یک و دو معادله‌ای که برای هیدروکربن‌های سبک توسعه داده شده‌اند مقدار تولید دوده را بسیار دور از واقعیت پیش‌بینی می‌کنند و نشان می‌دهد که برای پیش‌بینی تشکیل دوده در هیدروکربن‌های سنگین نامناسب می‌باشند. همچنین نشان داده شده است که با افزایش دمای هوای احتراق میزان تشکیل دوده نیز افزایش یافته است.

منابع

- 1 M. Ammann, M. Kalberer, D.T. Jost, L. Tobler, E. Rössler, D. Piguet, H.W. Gäggeler, and U. Baltensperger, "Heterogeneous production of nitrous acid on soot in polluted air masses" *Nature*. vol. 395, pp. 157–160. September 1998.
- 2 X. Bai, M. Balthasar, F. Mauss and L. Fuchs, "Detailed soot modeling in turbulent jet diffusion flames", *Twenty-Seventh Symp Int Combust Combust Inst*, vol. 27, pp.1623–1630, 1998.
- 3 K. K. Kuo and R. Achary, *Fundamentals of Turbulent and Multiphase Combustion*, John Wiley & Sons, Inc Hoboken, New Jersey, 2012.
- 4 Kazakov, H. Wang and M. Frenklach, "Detailed modeling of soot formation in laminar premixed ethylene flames at a pressure of 10 bar," *Combust and Flame*. vol.100, pp.111–120. January 1995.
- 5 L. Mazzei, S. Puggelli, D. Bertini, D. Pampaloni and A. Andreini, "Modelling Soot Production and Thermal Radiation for Turbulent Diffusion Flames," *Energy Procedi*, vol. 126, pp. 826-833. 2017.
- 6 R.B., Edelman and P.T Harsha, "Laminar and turbulent gas dynamics in combustors—current status", *Prog. Energy Combust. Sci*. vol.4, pp.1–62. August 1978.

- 7 M. Frenklach, D.W. Clary, W.C.Gardiner, and S.E. Stein, "Detailed kinetic modeling of soot formation in shock-tube pyrolysis of acetylene," *Symp. (Int.) Comb.* vol. 20, pp. 887–901. 1985.
- 8 S.B. Dworkin, Q. Zhang, M. J. Thomson, N. Slavinskaya and U. Riedel, "Application of an enhanced PAH growth model to soot formation in a laminar co-flow ethylene/air diffusion flame," *Combust. Flame*, vol. 158, pp. 1682–1695. 2011.
- 9 F. Bisetti, G. Blanquart, M. E. Mueller, and H. Pitsch, "On the formation and early evolution of soot in turbulent non-premixed flames," *Combust. Flame*. vol.159, pp. 317–335. January 2012.
- 10 A. Kazakov, and M. Frenklach, "Dynamic modeling of soot particle coagulation and aggregation: implementation with the method of moments and application to high-pressure laminar premixed flames," *Combust. Flame*. vol. 114(3–4), pp. 484–501. 1998.
- 11 M. Frenklach and S. J. Harris, "Aerosol dynamics modeling using the method of moments," *J. Colloid Interface Sci.* vol. 118, pp. 252–261. July 1987.
- 12 M. Khan and G. Greeves, "A Method for Calculating the Formation and Combustion of Soot in Diesel Engines". In N. H.Afgan and J. M.Beer, *Heat Transfer in Flames*. Chapter 25 Scripta, Washington DC. 1974.
- 13 P. A. Tesner, T. D. Snegiriova, and V. G. Knorre, "Kinetics of Dispersed Carbon Formation,". *Combustion and Flame*. vol. 17, pp. 253–260. October 1971.
- 14 S. J. Brookes, and J. B. Moss, "Prediction of Soot and Thermal Radiation in Confined Turbulent Jet Diffusion Flames,". *Combustion and Flame*. vol. 116, pp. 486–503. March 1999.
- 15 Z.Wen, S. Yun, M. J. Thomson, and M.F. Lightstone, "Modeling Soot Formation in Turbulent Kerosene/Air Jet Diffusion Flames". *Combustion and Flame*," vol. 135, pp. 323-340, November 2003.
- 16 Manedhar Reddy Busupally and Ashoke De, "Numerical modeling of soot formation in a turbulent C2H4/air diffusion flame," , *International Journal of Spray and Combustion Dynamics*, vol. 8, pp. 1–19, April 2016.
- 17 F. Bazdidi-Tehrani, M.S. Abedinejad, and Milad Mohammadi."Analysis of Relationship between Entropy Generation and Soot Formation in Turbulent Kerosene/Air Jet Diffusion Flames," , *Energy & Fuels*, vol. 33, pp. 9184-9195. 2019.
- 18 Mazzei, L.; Puggelli, S.; Bertini, D.; Pampaloni, and D.; Andreini, A. "Modelling soot production and thermal radiation for turbulent diffusion flames," *Energy Procedia*. Vol. 126, pp. 826-833. 2017.
- 19 Sarlak, R.; Shams, M. and Ebrahimi, R. "Numerical simulation of soot formation in a turbulent diffusion flame: comparison among three soot formation models," *Proc. Inst. Mech. Eng., Part C*. vol. 226, pp. 1290-1301. 2012.
- 20 K.J. Young, C.D. Stewart and J.B. Moss, "Soot formation in turbulent nonpremixed kerosene-air flames burning at elevated pressure: Experimental measurement," *Symposium (International) on Combustion*, vol. 1, pp. 609-617. 1994.
- 21 S. W.P. Jones, and B.E. Launder, "The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence," *Int. J. Heat. Mass Trans.* vol. 15, pp. 301-314. February 1972.
- 22 N. Peters, "Laminar Flamelet Concept in Turbulent Combustion," *21th Combustion Symposium on Combustion*. vol. 21, pp. 1231-1250, 1986.
- 23 J.B. Moss, C. D. Stewart, and K.J. Young,"Modeling soot formation and burnout in a high temperature laminar diffusion flame burning under oxygen-enriched conditions,". *Combustion Flame*, vol. 101, pp. 491-500. June 1995.
- 24 R.J. Hall, M.D. Smooke, and M.B. Colket, *Physical and Chemical Aspect of Combustion*, Gordon and Breach. 1997.
- 25 F. Liu, H. Guo, G. J., Smallwood, and Ö.L. Gülder, "Effects of gas and soot radiation on soot formation in a coflow laminar ethylene diffusion flame", *J. Quant. Spectrosc. Ra.* vol. 73, pp 409–421. April 2002.
- 26 B. Sirjean, E. Dames, D. A. Sheen, X.-Q. You, C. Sung, A. T. Holley, F. N. Egolfopoulos, H. Wang, S. S. Vasu, D. F. Davidson, R. K. Hanson, H. Pitsch, C. T. Bowman, A. Kelley, C. K. Law, W. Tsang, N. P. Cernansky, D. L. Miller, A. Violi and R. P. Lindstedt, "A high-temperature chemical kinetic model of n-alkane oxidation, JetSurF" version 1.0, September 15, 2009 (<http://web.stanford.edu/group/haiwanglab/JetSurF/JetSurF1.0/index.html>)
- 27 K. Leung, R. Lindstedt, and W. A. Jones, "Simplified Reaction Mechanism for Soot Formation in Nonpremixed Flames," , *Combust Flame*, vol. 87. pp. 289–305. December 1991.
- 28 Lee, K. B., Thring. M.W., and Beer J. M., "On the rate of combustion of soot in a laminar soot flame," *Combustion and Flame*, vol. 6. pp.137-145, 1962.

English Abstract

Numerical Study of Soot Formation of Pre-vaporized Heavy Hydrocarbon Combustion in a Diffusion Flame

Hamed Zeinivand^{1*}, Erfan Hosseini Doost², Sajjad Rezayat³, Hossein Bahadori⁴

1-Research and Technology, Mapna Boiler, Tehran, Iran, Hamed.Zeinivand@mapnabe.com

2-Research and Technology, Mapna Boiler, Tehran, Iran, erfan.hoseinidoost@Mapnabe.com

3-Research and Technology, Mapna Boiler, Tehran, Iran, Sajjad.Rezayat@Mapnabe.com

4-Research and Technology, Mapna Boiler, Tehran, Iran, hossein.bahadori@Mapnabe.com

*Corresponding author

(Received: 2024/04/02, Received in revised form: 2024/07/17, Accepted: 2024/08/03)

In this article, the investigation and modeling of soot formation in a combustion chamber with pre-vaporized kerosene fuel and air has been attempted. Flamelet model in conjunction with Jet-Surfl mechanism has been used to model gas phase combustion. Species such as C_2H_2 , C_2H_4 , C_6H_6 , C_6H_5 are considered as the precursors of soot. The results of the numerical simulation show a good agreement with the existing experimental results. By examining different models of soot formation, it has been shown that the Moss-Borks-Hall model developed for heavy hydrocarbons shows better performance than other soot prediction models. The Brooks-Hall model predicts the amount of soot production less than the Brooks-Hall-Moss model, however, it provides better results than the single and two-equation models. It has also been shown that with the increase in the combustion air temperature the amount of soot formation has also increased.

Keywords: Soot Formation, Combustion Modeling, Reactive Flow, Moss-Brook-Hall Model, Flamelet Model