مجله مهندسی مکانیک مدرس، آبان 1396، دوره 17، شماره 8، ص‌ص 105-116

ماهنامه علمی پژوهشی

مهندسی مکانیک مدرس

mme.modares.ac.ir

مقایسه اثرات چند سینتیک شیمیایی کلی بر شبیه‌سازی سه‌بعدی شعله برخاستهٔ متان

امین جلالیان[1]، کیومرث مظاهری[2*]

1- دانشجوی دکترا، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

2- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

* تهران، صندوق پستی 111-14155، kiumars@modares.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 03 خرداد 1396

پذیرش: 13 تیر 1396

ارائه در سایت: 17 مرداد 1396

کلید واژگان:

شبیه‌سازی احتراق

متان

سینتیک شیمیایی

اپن‌فوم

واکنش‌گاه آمیخته‌ی جزئی

چکیده

در کار حاضر مقایسه اثرات چند سینتیک شیمیایی کلی در شبیه‌سازی 3 بعدی احتراق متان، توسط مجموعه کد متن‌باز اپن‌فوم، در یک محفظه احتراق افقی که دارای شعله برخاسته می‌باشد، مورد نظر است. هدف از این مقایسه، مشاهده اثرات سینتیک‌های کلی یک، دو و چهار مرحله‌ای بر سرعت، توزیع گونه‌ها و دما است. در این شبیه‌سازی، معادلات بقا و حالت بطور هم‌زمان حل و معادلات مشتق جزئی توسط روش حجم محدود گسسته می‌گردند. اثرات آشفتگی با روش $k-\varepsilon$، تابش با مدل P1 و برهم‌کنش آشفتگی و احتراق با روش PaSR محاسبه می‌شوند. نتایج عددی به وسیله‌ی داده‌های آزمایشگاهی محفظه احتراق استوانه‌ای صحت‌سنجی گردید. نتایج نشان می‌دهد که سینتیک‌های مذکور دارای اختلاف در نتایج سرعت، دما و گونه‌ها در یک‌سوم انتهایی محفظه که محل استقرار شعله است، می‌باشند و مکان شعله را متفاوت از یکدیگر پیش‌بینی می‌کنند و سینتیک‌های 4مرحله‌ای دارای دقت بهتری نسبت به نوع 2مرحله‌ای هستند. در بین مکانیزم‌های 4مرحله‌ای مدل JL دارای دقت و زمان محاسبات بیشتری است، سینتیک‌های یک مرحله‌ای قادر به حفظ شعله‌ی برخاسته نبودند. نوع 2مرحله‌ای نسبت به نتایج تجربی شعله را در پایین‌دست و مدل کیم نسبت به نتایج تجربی شعله را در بالادست بازسازی می‌کند.

Comparison of some global chemical kinetics effects on methane lifted flame 3D simulation

Amin Jalalian, Kiumars Mazaheri*

Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran
* P.O.B. 14155-111 Tehran, Iran, kiumars@modares.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 24 May 2017
Accepted 04 July 2017
Available Online 08 August 2017

Keywords:
Combustion Simulation
Methane
Chemical Kinetic
OpenFOAM
PaSR

ABSTRACT

In the present study, the effects of several global chemical kinetics in 3-dimensional numerical simulation of methane combustion in a horizontal combustion chamber which has lifted flame by a set of open source code OpenFOAM, are compared. The purpose of this comparison is to study the effects of 1, 2 and 4 step global kinetics on velocity, temperature and species distribution. In this simulation, conservation and state equations are solved simultaneously. Partial differential equations are discreted by finite volume method. The effects of turbulence by standard k-e, radiation by P1 model and turbulence-combustion interaction by PaSR are modeled. The results of numerical simulations have been validated by cylindrical combustion chamber experimental data. The results show that the chemical kinetics have considerable differences in the results of velocity, temperature and species in the final third of the chamber where the flame is located, and predict locations of the flame differently. According to these results, 4-step mechanisms were more accurate than the 2-step type. Between 4 step mechanisms, JL is more accurate than Kim overall; however, its calculation time is higher than the Kim. Single step chemical kinetics were not able to keep the lifted flame. Towards the experimental results, 2-step model predicts the flame in downward and Kim mechanism estimates the flame in the upward.

1- مقدمه

گاز طبیعی به‌عنوان یک سوخت فسیلی، به‌طور فراوان جهت گرمایش، تولید برق، حرکت خودرو و مصارف مسکونی استفاده می‌شود. تقریباً یک‌چهارم انرژی جهان از این سوخت تأمین می‌شود [1]. متان بخش عمده گاز طبیعی را تشکیل می‌دهد، چند هیدروکربن و گونه‌ی دیگر از جمله نیتروژن نیز به‌طور جزئی در ترکیب آن وجود دارد. ایران به‌عنوان دومین دارنده گاز طبیعی در جهان، از این سوخت به‌طور فراوان استفاده می‌کند؛ از این روی، بررسی و شبیه‌سازی احتراق آن، از نظر ساختار حرارتی شعله و تولید آلاینده‌ها و گازهای گل‌خانه‌ای، به عنوان ابزاری برای مطالعات مربوط به افزایش راندمان احتراق و کاهش آلاینده‌ها، ضروری است. در شبیه‌سازی فرایند احتراق، مکانیزم (سینتیک) شیمیایی، تأثیر قابل توجهی بر نتایج دارد. به‌کارگیری سینتیک نامناسب باعث خطاهای جدی در نتایج، از قبیل دما، مکان شعله و به ویژه گونه‌ها می‌گردد. سینتیک برای محاسبه نرخ تولید و مصرف گونه‌ها، در عبارت چشمه‌ی معادله بقای گونه‌ها بکار می‌رود. سینتیک‌های تفصیلی (تشریحی)[1] گرچه دارای دقت بیشتر نسبت به سینتیک‌های کاهش یافته[2] و کلی[1] هستند اما به مراتب دارای زمان

[1] Detailed kinetics
[2] Reduced

Please cite this article using:

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

A. Jalalian, K. Mazaheri, Comparison of some global chemical kinetics effects on methane lifted flame 3D simulation, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 8, pp. 207-216, 2017 (in Persian)

محاسبات بیشتری هستند به گونه‌ای که در بسیاری از شبیه‌سازی‌ها استفاده از آن‌ها به صرفه نیست. هزینه محاسبات، بیشتر از اینکه تابع تعداد واکنش‌ها باشد تابع تعداد گونه‌هاست؛ زیرا برای هر گونه‌ی جدید باید معادله انتقال جدیدی به همراه معادله دیفرانسیل معمولی برای ترم تولید/مصرف محاسبه گردد؛ ولی با اضافه شدن هر واکنش، فقط حل معادله دیفرانسیل معمولی در همان معادلات انتقال سابق، دچار افزایش محاسبات می‌شود که نسبت به حل یک معادله انتقال، زمان محاسبات کمتری دارد. زمان محاسبات بطور تقریبی متناسب است با N^2 که N تعداد گونه‌هاست لذا اضافه شدن یک گونه، تاثیر قابل توجهی بر آن دارد [2]. در بسیاری از کاربردها، مانند تقریبأت مهندسی، اطلاعات شیمیایی زیاد ارائه شده توسط سینتیک‌های تفصیلی، مورد نیاز نیست و مکانیزم واکنش کلی با در نظر گرفتن شرایط کاربردشان، کفایت می‌کند [3,1]. شایان ذکر است بسیاری از سینتیک‌های ساده شده‌ی رایج، در تخمین صحیح نتایج تجربی دچار مشکل هستند [2].

احتراق متان از نظر مکانیزم واکنش کلی، مورد بررسی‌های فراوانی قرار گرفته است. وستبروک و درایر [2] در سال 1981 سینتیک‌های تک مرحله‌ای (WD1) و 2مرحله‌ای (WD2) را ارائه کردند. جونز و لیندستد [4] در سال 1988 سینتیک 4مرحله‌ای (JL) منتشر نمودند. اندرسن [5] در سال 2009 با استفاده از سینتیک‌های WD و JL، سینتیکی اصلاح شده برای احتراق متان و اکسیژن ارائه کرد. کیم [1] در سال 2008 مکانیزم واکنش JL را به 2 صورت، اصلاح و صحت‌سنجی کرد که یکی از آن حالت‌ها، دارای واکنش 2 طرفه نبود. با وجود پژوهش‌های فراوان در زمینه شبیه‌سازی احتراق، نیاز به مکانیزم‌های شیمیایی کلی قابل اعتماد، به گونه‌ای که بتوانند با دقت قابل قبول، دما و خصوصیات مهم ساختار شیمیایی شعله را در محدوده‌های مختلفی از دما، فشار و نسبت هم‌ارزی به درستی پیش بینی کنند، همچنان وجود دارد. در بخش سینتیک‌های شیمیایی، با جزئیات بیشتر به برخی از این نتایج پرداخته می‌شود.

بنابراین، جمع‌آوری و بررسی مکانیزم‌های کلی موجود، از نظر هزینه محاسباتی و دقت نتایج، برای انتخاب بهینه در شبیه‌سازی احتراق متان، از اهمیت زیادی برخوردار است؛ در کار حاضر برای بررسی اثرات سینتیک‌های کلی، تعدادی از آن‌ها مورد استفاده قرار گرفت و نتایج آن‌ها در یک مسأله‌ی نمونه با نتایج تجربی مقایسه شد. مسأله‌ی نمونه، یک محفظه احتراق استوانه‌ای است که سوخت و هوا بطور غیرپیش‌آمیخته وارد آن می‌شوند. این محفظه در سال 1994 توسط گارتون و سیمونین [6] مورد آزمایش قرار گرفت و توسط پژوهشگران مختلف مورد شبیه‌سازی واقع شد. از مشخصه‌های بارز در این مسأله، برخاستگی قابل توجه شعله است.

میگل در سال 1996 [8,7] این مسأله را شبیه‌سازی و در آن از سینتیک تفصیلی و اسکلتی[2]، مدل احتراقی EDC[3] و هندسه متقارن محوری استفاده کرد و نتیجه‌گیری نمود که فرض پایا بودن رادیکال‌ها، جهت افزایش سرعت محاسبات، تغییر خاصی در نتایج ایجاد نمی‌کند. در کار دیگر در سال 2000، برینک [9] با روش ترکیبی EBU[4] و سینتیک کلی 4مرحله‌ای، در هندسه متقارن محوری جواب‌های قابل قبولی گرفت. در این کار دیده شد که فرض شیمی سریع باعث جواب‌های نادرستی می‌شود. در سال 2005 سیلوا [10] این محفظه را بطور متقارن محوری همراه مدل تابشی انتقال مجزا[5]، مدل تخمین خواص تابشی WSGGM[6] و با ترکیب روش‌های EBU و آرنیوس به عنوان مدل احتراقی، با مکانیزم واکنش 2مرحله‌ای شبیه‌سازی نمود. پارامترهای ضرایب نرخ آرنیوسی واکنش‌های مذکور بدون ذکر هیچگونه اصلاحی، به 2 مرجع [3] و [11] ارجاع داده شده‌اند، که در مرجع [3] سینتیک آرنیوسی 2مرحله‌ای متان یافته نشد و در [11] ضریب پیش‌توانی مربوطه، مقدار بسیار متفاوتی دارد. در کار مذکور نتیجه‌گیری شد که فقط در ناحیه جت مرکزی تا حدود دو سوم از طول محفظه، عدد دامکوهلر کمتر از یک بوده و فرایند احتراق تحت تسلط سینتیک شیمیایی است و با روش آرنیوس مدل می‌شود و مابقی نواحی دارای دامکوهلر بیشتر از یک بوده و احتراق تحت کنترل جریان قرار دارد و با روش EBU مدل می‌شود. در مسائلی که درگیر با اعداد دامکوهلر کوچک و بزرگ است از روش‌های ترکیبی استفاده می‌شود. نتایج حاصله در کل تطابق قابل قبولی با نتایج تجربی دارد. سیلوا در سال 2007 [12] از سینتیک 2مرحله‌ای برای متان در این مسأله استفاده کرد و به بررسی اثرات تابش پرداخت، تابش در این مسأله با استفاده از روش ناحیه‌ای[7] و مدل WSGGM بررسی و دیده شد که تابش اثر زیادی بر دما دارد، گرچه تاثیرش بر گونه‌ها دارای اهمیت کمتری است. در این کار با توجه به کم بودن مقدار دوده در احتراق متان (به دلیل محتوای کربن کمتر در مقایسه با سایر هیدروکربن‌ها)، از اثرات دوده در تابش صرفنظر شد و از ترکیب مدل‌های EBU و آرنیوس استفاده گردید. همچنین رونچتی در سال 2007 [13] با استفاده از نرم‌افزار CFX اثر اضافه کردن لوله خروجی به انتهای محفظه و روش‌های مختلف مدل‌سازی آشفتگی را بررسی کرد و نتیجه گرفت، در این مسأله، اضافه کردن لوله باعث افزایش دقت نتایج شده و روش استاندارد $k-\varepsilon$ دارای کارآیی بهتری نسبت به مدل‌های $k-\omega$ و SST $k-\omega$ است. پارامترهای سینتیک 2مرحله‌ای درج شده در کار مذکور دارای مرتبه واکنش‌های بعضا ناصحیح و ضریب پیش‌توانی غیرعادی است که بکار بردن آن‌ها باعث ضریب نرخ واکنش بسیار ناچیز در واکنش اکسیداسیون متان، در مقایسه با ضریب نرخ واکنش حاصل از مکانیزم WD2 که یک مکانیزم معتبر است، خواهد شد. در مرجع [14] در سال 2013 این محفظه با نرم‌افزار CFX و ترکیب مدل‌های EBU و آرنیوس بطور 3 بعدی شبیه‌سازی و اثر شناوری در آن بررسی شد و نتیجه‌گیری گردید که گرانش اثر چندانی در نتایج ندارد. در آن کار ادعا گردیده که پارامترهای سینتیک WD2 از مرجع [15] آورده شده است اما ضریب پیش توانی دارای مقدار مشخصا غیرعادی و غیرقابل قیاس با سینتیک‌های رایج مانند WD2 در [16,2] است.

همانگونه که دیده شد، در شبیه‌سازی‌های عددی که با سینتیک‌های کلی روی مسأله نمونه انجام شده است، مدل‌های احتراقی بکار رفته عموما EBU و EDC است و از روش واکنش‌گاه آمیخته‌ی جزئی یا PaSR[8] تاکنون در این امر استفاده نشده است. هندسه‌ها نیز بجز یک مورد، بصورت متقارن محوری مدل شده‌اند و این باعث می‌شود نقش عدم تقارن‌ها در صورت وجود، دیده نشود. لازم به ذکر است مرجع [14] گزارشی از وجود تقارن در شبیه‌سازی 3 بعدی بدون گرانش، ارائه نکرد و احتمال دارد که عدم تقارن و جریانات ثانویه در شبیه‌سازی 3 بعدی شکل بگیرد؛ در برخی فیزیک‌ها مانند جریان روی کره و احتراق در مقیاس میکرو، با وجود هندسه و شرایط مرزی متقارن، عدم تقارن در نتایج روی می‌دهد. همچنین در برخی از شبیه‌سازی‌های مذکور یعنی مراجع [14,13,10] مقادیر پارامترهای ضرایب

[1] Global
[2] Skeletal
[3] Eddy dissipation concept
[4] Eddy break up
[5] Discrete transfer radiation model
[6] Weighted sum of gray gases model
[7] Zonal method
[8] Partially stirred reactor

نرخ واکنش و توان‌های غلظت، نادرست درج گردیده‌اند، که با توجه به نتایج قابل قبولی که از آن‌ها بدست آمده، نتیجه گرفته می‌شود که اشتباه در چاپ پارامترهای مذکور رخ داده است. در کار حاضر محفظه احتراق مذکور بطور 3 بعدی، با استفاده از مجموعه کد متن باز اپن‌فوم[1] نسخه 4، که دارای مدل احتراقی نسبتا جدید PaSR است، و سینتیک‌های کلی مختلف که از مراجع اصلی استخراج شده است، شبیه‌سازی شد. از مزایای کار حاضر می‌توان به درنظر گرفتن اثرات جریان 3 بعدی، استفاده از روش PaSR و سینتیک‌های شیمیایی مختلف با پارامترهای دقیق نرخ اشاره کرد.

2- معادلات حاکم و روش عددی

در شبیه‌سازی حاضر، معادلات بقای جرم، مومنتوم، گونه‌ها و انرژی و معادله حالت بطور هم‌زمان حل شدند. معادلات مشتق جزئی توسط روش حجم محدود گسسته گردید. جهت کوپل فشار و سرعت از روش PISO استفاده شد. برای تکمیل معادلات، از روش استاندارد $k-\varepsilon$ برای آشفتگی، مدل P1 برای انتقال حرارت تابشی، روش متوسط خاکستری[2] برای قابلیت جذب و صدور مخلوط گازی، مدل PaSR برای اندرکنش آشفتگی و احتراق، سینتیک‌های کلی برای جمله چشمه در معادله گونه‌ها، روش ونلیر کران‌دار[3] برای تخمین جملات غیرخطی جابجایی و روش اولر برای جمله‌ی گذرا استفاده شد و حل معادلات مشتق معمولی در محاسبات احتراقی با روش SIBS[4] مورد محاسبه قرار گرفت. گام زمانی بخاطر وجود احتراق از مرتبه 1e-5 s قرار داده شد. علل انتخاب مدل‌های مذکور، به این شرح می‌باشد، روش PISO از دسته الگوریتم‌های SIMPLE و دارای تقریب خوبی از ارتباط تصحیحات فشار و سرعت بوده و در مسائل گذرا بر روش SIMPLE برتری دارد [16]. برای مدل‌سازی آشفتگی، از زیرمجموعه مدل‌های روش متوسط‌گیری زمانی RANS استفاده شد، در اکثر کارهای انجام شده روی این مسأله از جمله [7,8,12,13,17] از روش $k-\varepsilon$ استاندارد استفاده شد، این مدل نسبت به مدل‌های پرکاربرد دیگر از جمله مدل‌های $k-\omega$ و SST $k-\omega$ منجر به نتایج بهتری می‌شود، از جمله در پژوهش [13] این مقایسه انجام شد. با توجه به توانمندی و دقت قابل قبول و در عین حال به صرفه بودن روش $k-\varepsilon$ استاندارد [16]، در کار حاضر از این روش استفاده گردید. مدل P1 دارای دقت مناسب و کاربرد فراوان در تخمین تابش در مسائل احتراق گازی است و نسبت به روش DO از نظر زمان محاسبات سریع‌تر است. روش متوسط خاکستری برای قابلیت جذب و صدور از چندجمله‌ای‌های تابع دما استفاده می‌کند. روش PaSR در بین مدل‌های اندرکنش آشفتگی و احتراق موجود در بسته اپن‌فوم، بواسطه درنظرگرفتن شیمی نرخ محدود، پرکاربردترین مدل است. در بخش مربوطه توضیحات لازم در مورد آن داده می‌شود. روش ونلیر نسبت به روش پادبادسو[5]، خطای نفوذ عددی[6] کمتری دارد و نسبت به روش کوئیک خطای زیاد یا کم‌برآوردکردن[7] ندارد [18]. روش SIBS برای حل ماتریس‌های سخت[8] در مسائل احتراقی، روش قدرتمندی است.

مطابق یافته‌های [14,10] در این مسأله اثر گرانش قابل توجه نیست، بنابراین از اثرات آن صرفنظر شد. بنابر بررسی‌های کار حاضر، اعمال نمودن گرانش باعث افزایش قابل توجه زمان پایا شدن مسأله می‌شود. بخاطر ناچیز بودن دوده در احتراق متان، از اثرات دوده در تابش صرف‌نظر شد [12].

معادلات حاکم بر جریان آشفته‌ی احتراقی در مراجع مختلفی از جمله [19] تشریح شده است، در کار حاضر فقط به آوردن معادلات مورد نیاز برای تحلیل و بحث اکتفا شد. معادله بقای گونه‌ها در رابطه (1) آورده شد [19].

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_k)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{Y}_k)=-\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{V_{k,i}Y_k}+\bar{\rho}\widetilde{u_i''Y_k''}\right)+\overline{\dot{\omega}_k} \quad (1)$$

بالانویس ~ نشانه‌ی متوسط گیری وزنی با جرم[9] و بالانویس – نشانه‌ی متوسط‌گیری رینولدزی است. Y_k کسر جرمی گونه k، $V_{k,i}$ سرعت نفوذی گونه در جهت i[10]، $u_i''Y_k''$ شار آشفته گونه[11] و عبارت چشمه $\dot{\omega}_k$ نرخ واکنش (نرخ خالص تولید/مصرف) گونه k است. این نرخ، حاصل جمع جبری تولید و مصرف گونه k در واکنش‌های مربوط به این گونه است. نرخ مذکور را می‌توان در جریانات آرام از مدل آرنیوس و در جریانات آشفته از مدل‌هایی نظیر EBU، EDM[12]، EDC یا PaSR بدست آورد. نرخ واکنش گونه k که در تعداد M واکنش شرکت دارد، مطابق رابطه (2) محاسبه می‌شود [19].

$$\dot{\omega}_k=\sum_{j=1}^{M}\dot{\omega}_{kj}=W_k\sum_{j=1}^{M}\upsilon_{kj}q_j \quad (2)$$

در این رابطه، $\dot{\omega}_{kj}$ نرخ تولید یا مصرف گونه k در واکنش j، W_k جرم مولکولی گونه، υ_{kj} اختلاف ضرایب استوکیومتری گونه k در واکنش j در حالت برگشت و رفت و q_j نرخ پیشروی واکنش j است که مطابق روابط (3) و (4) محاسبه می‌شوند [19].

$$\upsilon_{kj}=\upsilon''_{kj}-\upsilon'_{kj} \quad (3)$$

$$q_j=K_{fj}\prod_{s=1}^{N}[X_s]^{\gamma'_{sj}}-K_{rj}\prod_{s=1}^{N}[X_s]^{\gamma''_{sj}} \quad (4)$$

که υ'_{kj} و υ''_{kj} ضرایب استوکیومتری گونه k در واکنش j، به ترتیب در حالات رفت و برگشت، K_{fj} و K_{rj} ضریب نرخ واکنش[13] j به ترتیب در حالات رفت و برگشت، N تعداد گونه‌هایی که باید در محاسبه نرخ پیشروی واکنش j منظور گردند و $[X_s]$ غلظت گونه s است. γ'_{sj} و γ''_{sj} توان غلظت یا مرتبه‌ی واکنش نسبت به گونه s[14] در حالات رفت و برگشت است که اگر واکنش بنیادی نباشد غالبا متفاوت از υ'_{kj} و υ''_{kj} است. K_{fj} از رابطه (5) معروف به فرم آرنیوسی نرخ واکنش محاسبه می‌شود که دارای پارامترهای A، b و E (پارامترهای ضریب نرخ واکنش[15]) است [19].

$$K_{fj}=A_{fj}T^{b_j}\exp\left(\frac{-E_j}{R_uT}\right)=A_{fj}T^{b_j}\exp\left(\frac{-T_{aj}}{T}\right) \quad (5)$$

در رابطه فوق، A_{fj} ضریب پیش‌توانی[16]، E_j انرژی فعال‌سازی واکنش jام، b_j توان دما، R_u ثابت جهانی گازها، T دما و T_{aj} دمای فعال‌سازی است که در برخی قالب‌های نرم‌افزاری مانند اپن‌فوم به جای عبارت E_j/R_u از آن استفاده می‌شود. K_{rj} طبق رابطه (6) با استفاده از ثابت تعادل محاسبه می‌شود [3].

$$K_{rj}=K_{fj}/K_{cj} \quad (6)$$

K_{cj} ثابت تعادل بر حسب غلظت است که در مرجع [1] روابط ثابت تعادل برای برخی واکنش‌ها به صورت چندجمله‌ای ارائه شده است.

[1] OpenFOAM
[2] Gray mean coefficients
[3] Bounded vanleer
[4] Semi Implicit Bulirsch Stoer (SIBS)
[5] Upwind
[6] Numerical diffusion or False diffusion
[7] Overestimate or Underestimate
[8] Stiff
[9] Favre averaging
[10] i-component of diffusion velocity
[11] Species turbulent flux
[12] Eddy dissipation model
[13] Reaction rate coefficient
[14] Reaction order with respect to s
[15] Reaction rate coefficient parameters or Arrhenius rate parameters
[16] Pre-exponential factor or Frequency factor

2-1- سینتیک‌های شیمیایی

جهت محاسبه ترم تولید یا مصرف در معادله انتقال گونه‌ها، نیاز به شناخت واکنش‌های شیمیایی دخیل در احتراق است. بدین منظور آزمایشات فراوانی انجام شده است تا واکنش‌های رخ داده در احتراق سوخت‌های مختلف و نرخ واکنش گونه‌های دخیل مشخص گردد. اکثر واکنش‌های احتراقی دارای تعداد زیادی از واکنش‌های مقدماتی (بنیادی) است، برای مثال در احتراق متان و هوا تا 352 واکنش بنیادی و 53 گونه مشخص شده است [20]. در شبیه‌سازی، استفاده از مکانیزم‌هایی با این تعداد واکنش، از نظر هزینه محاسباتی معمولا به صرفه نیست. برای کاهش زمان محاسبات از سینتیک‌های کلی که توسط کارهای آزمایشگاهی و عددی تخمین زده شده‌اند استفاده می‌گردد. واکنش‌های کلی راه رایجی است برای تقریب تاثیرات واکنش‌های بنیادی زیادی که در واقعیت رخ می‌دهند [2]. در احتراق متان-هوا، معمولا سینتیک‌های کلی 4، 2 و 1مرحله‌ای بکار می‌روند. البته سینتیک‌های کلی با توجه به فرم آرنیوسی، دارای انواع مختلفی از نظر پارامترهای ضریب نرخ و مرتبه واکنش، با وجود واکنش یکسان هستند، که هرکدام برای شرایط فیزیکی خاصی از نظر دما و فشار و غیره ارائه شده‌اند. در مکانیزم واکنش‌های ساده شده، بسیاری از گونه‌ها به ویژه رادیکال‌های با قابلیت نفوذ شدیدا بالا[1] مانند H، O و OH درنظر گرفته نمی‌شوند. از نظر وستبروک [2]، مطابق این ساده‌سازی، ویژگی‌های ساختاری شعله که وابسته به جزئیات انتقال مولکولی گونه‌ها هستند، صرفنظر از مدل انتخابی برای نفوذ، با این مکانیزم واکنش‌ها به درستی قابل بازسازی نیست.

در ادامه به بررسی و تشریح چند سینتیک کلی معروف پرداخته می‌شود.

2-1-1- سینتیک یک مرحله‌ای WD1[2]

این سینتیک در مرجع [2] برای واکنش کلی (R- 1) تنظیم گردید، برای ساده سازی فرض شد توان دما (b_j) صفر باشد. انرژی فعال‌سازی (E_a) برای جریان آرام، مقدار 30 kcal/mol انتخاب شد که بین مقدار کم‌تر 26 kcal/mol ارائه شده توسط فن [21] و مقدار زیادتر 40 kcal/mol ارائه شده توسط واکر [22] قرار می‌گیرد و ادعا شد که تغییرات E_a در محدوده 40-26 فقط روی ضخامت شعله موثر است و از آنجا که داده تجربی برای ضخامت شعله وجود نداشت و نیز نتایج حاصل از 30 kcal/mol تطابق رضایت بخشی با نتایج تجربی داشت، این مقدار انتخاب شد [2]. برای سایر مقادیر انرژی، باید پارامترهای دیگر در ضریب نرخ واکنش را با مقایسه داده‌های عددی و تجربی محاسبه کرد. برای جریان آشفته مقدار انرژی فعال‌سازی با توجه به کار [23] مقدار 48.4 kcal/mol انتخاب شد. مطابق نتایج [2] توان‌های غلظت تقریباً مستقل از انرژی فعال‌سازی هستند و فقط پارامتر A تغییر می‌یابد. شایان ذکر است در [24] 2 اشتباه چاپی در مقادیر ضریب پیش‌توانی مرجع [2]، اصلاح گردید و مورد تایید نویسندگان [2] واقع شد [24].

$$CH_4+2O_2 \rightarrow CO_2+2H_20 \qquad (R-1)$$

مبنای اصلی صحت سنجی پارامترهای ضریب نرخ و توان‌های غلظت در [2]، سرعت شعله و حدود شعله‌وری بود. سرعت شعله متناسب با جذر نرخ واکنش است، همچنین نشان داده شد که سرعت شعله با مقدار فشار به توان یک عدد ثابت که مرتبط با مرتبه واکنش است نیز متناسب است (رابطه (7)).

$$S_u = S_0 P^{-x} \qquad (7)$$

که در آن S_u سرعت شعله، P فشار، x و S_0 مقادیری ثابت و تابع نوع سوخت هستند. x تابع فشار نیز هست. از وابستگی سرعت شعله به نرخ واکنش و بطور هم‌زمان به فشار نتیجه‌گیری شد که ممکن نیست با یک ضریب نرخ واکنش بتوان در هر دو محدوده فشار بالا ($P\geq4$ atm) و فشارپایین ($P\leq1$ atm) نتایج تجربی را بازسازی کرد. این نتیجه‌ی مهمی است که با مقایسه مدل‌سازی عددی و نتایج تجربی تایید شده است [2].

در پژوهش [2]، 5 سری پارامتر ضریب نرخ برای سینتیک تک مرحله‌ای احتراق متان ارائه شد. پارامترهای مذکور در جدول 1 در قالب نرم‌افزار کمکین[3] درج شده‌اند. 2 سری اول اگر چه دارای عمومیت بیشتری هستند اما دارای توان منفی برای غلظت متان هستند و امکان واگرایی عددی خصوصا در شعله‌های رقیق دارند، در کار حاضر نیز ایجاد واگرایی دیده شد، لذا در مرجع [2]، برای اینکه نرخ واکنش بطور مناسبی کران‌دار بماند، 3 سری پارامتر دیگر که توان منفی ندارند اضافه گردید. در کار حاضر سری سوم و چهارم از جدول 1 مورد بررسی قرار گرفتند، که مطابق نتایج مرجع مذکور نسبت به سری پنجم دارای دقت بالاتری هستند. توان‌های غلظت واحد، موجود در سری پنجم مشکلاتی ایجاد می‌نمایند که از جمله آن‌ها می‌توان به زیاد برآورد کردن سرعت شعله و حدود شعله‌وری اشاره کرد [2] لذا در کار حاضر مورد استفاده واقع نشد. لازم به ذکر است که پارامترهای سری چهارم برگرفته از نتایج [23] می‌باشد.

2-1-2- سینتیک 2 مرحله‌ای

سینتیک 1مرحله‌ای نواقصی دارد که در برخی کاربردها مهم می‌شود، برای مثال، گرمای کلی واکنش بیش از مقدار واقعی پیش‌بینی شده و با افزایش نسبت هم ارزی شدیدتر می‌گردد. در سوخت‌های معمولی هیدروکربنی در دماهای آدیاباتیک شعله‌ی حدود 2000 کلوین، مقادیر قابل توجهی از گونه‌های CO و H_2 در تعادل با CO_2 و H_2O هستند، این تعادل باعث کمتر شدن گرمای کلی واکنش و دمای آدیاباتیک شعله نسبت به حالت تک مرحله‌ای می‌شود. هرچه مقدار CO و H_2 در محصولات واقعی بیشتر باشد، خطای سینتیک 1مرحله‌ای بیشتر می‌شود. سینتیک 2مرحله‌ای WD2 در مرجع [2] معرفی گردید و بطور فراوان مورد بازنگری و استفاده قرار گرفت که شامل 2 واکنش (R- 2) و (R- 3) ارائه شده در [23] است.

$$CH_4+1.5O_2 \rightarrow CO+2H_20 \qquad (R-2)$$

$$CO + 0.5O_2 \leftrightarrow CO_2 \qquad (R-3)$$

برای محاسبه پارامترهای ضریب نرخ واکنش CO، مرجع [2] از نتایج [23] استفاده نمود، همچنین برای تخمین مناسب گرمای واکنش و وابستگی

جدول 1 پارامترهای ضرایب نرخ واکنش و مرتبه واکنش‌های سینتیک WD1 [2]

Table 1 Reaction Rate Coefficients Parameters and reaction orders of WD1 [2]

شماره سری	$A^{(*)}$ (K^{-b} $(cm^3/mol)^{r-1}s^{-1}$)	b	$E^{(**)}$ (cal/mol)	مرتبه‌های واکنش
اول	1.3e9	0	48400	$[CH_4]^{-0.3}$ $[O_2]^{1.3}$
دوم	8.3e6	0	30000	$[CH_4]^{-0.3}$ $[O_2]^{1.3}$
سوم	6.7e12	0	48400	$[CH_4]^{0.2}$ $[O_2]^{1.3}$
چهارم	1e13	0	48400	$[CH_4]^{0.7}$ $[O_2]^{0.8}$
پنجم	2.4e16	0	48400	$[CH_4]^{1}$ $[O_2]^{1}$

(*) r، مرتبه واکنش کلی[4] است که از مجموع مرتبه واکنش گونه‌ها بدست می‌آید.

(**)در تبدیل $T_a=E/R_u$ دقت شود که برای تطابق واحدها، R_u=1.986 cal/molK است.

[1] Highly diffusive
[2] Westbrook and Dryer
[3] CHEMKIN
[4] Overall reaction order

نسبت CO/CO_2 به فشار، یک واکنش معکوس برای اکسیداسیون CO طراحی گردید که باعث تخمین بهتر دمای آدیاباتیک و غلظت CO در حالت تعادلی می‌شود. پارامترهای ضرایب نرخ آرنیوسی در جدول 2 آمده است.

مطابق یافته‌های [2] نتایج سینتیک 2مرحله‌ای در مقایسه با نوع 1مرحله‌ای از نظر سرعت شعله تقریباً یکسان، اما بواسطه در نظر گرفتن تعادل CO با CO_2، از نظر دمای آدیاباتیک شعله، دقیق‌تر از آن است. در حالی‌که مقادیر $[CO]/[CO_2]$ را در شرایط رقیق بیشتر از سینتیک‌های تفصیلی و در شرایط غلیظ کمتر از آن‌ها پیش‌بینی می‌کند.

مطابق بحث‌های مطرح شده در [2] هر دسته از پارامترهای ضریب نرخ واکنش، اگر در مدل‌های عددی دیگر بکار رود، ضرایب پیش‌توانی باید بعنوان مقادیر تقریبی درنظر باشد؛ در کار مذکور ادعا شد که انتظار می‌رود انرژی فعال‌سازی و توان‌های غلظت برای مدل‌های دیگر هم صحیح باشند؛ لذا پارامترهای ارائه شده در مقاله حاضر، بعنوان حدس اولیه مناسب خواهند بود و با مقایسه نتایج با نتایج تجربی برای چند حالت مرجع، باید ضریب پیش‌توانی را تنظیم کرد. در رابطه آرنیوس (رابطه (5)) دیده می‌شود که انرژی فعال‌سازی و توان‌های غلظت اثر غیرخطی بر نرخ واکنش دارند در حالیکه اثر ضریب پیش‌توانی، خطی است و تنظیم آن پیچیدگی کمتری دارد. مطابق جدول 2، توان غلظت منفی برای (R- 2) وجود دارد که باعث واگرایی عددی می‌شود و در [2] برخلاف مکانیزم تک مرحله‌ای، جایگزینی پیشنهاد نشد. با مراجعه به مراجعی که این مکانیزم را برای شبیه‌سازی به‌کار برده‌اند از جمله [25,16] دیده شد که برای واکنش (R- 2) از پارامترهای مشابه حالت چهارم از جدول 1 استفاده نمودند، این پارامترها در [23] نیز ارائه شد. در کار حاضر برای جلوگیری از واگرایی عددی، پارامترهای [25] که توان غلظت منفی ندارد و با کمی تفاوت در نرم‌افزار تجاری فلوئنت [16] نیز استفاده می‌شود به کار رفت، که برای واکنش (R- 2) از مقادیر سری 4 از جدول 1 و برای واکنش‌های (R- 3) و (R- 3-rev) از مقادیر جدول 2، اما با انرژی فعال‌سازی 40700 cal/mol استفاده کرد.

2-1-3- سینتیک 4 مرحله‌ای JL[1]

سینتیک‌های 1مرحله‌ای می‌توانند نتایج قابل قبولی دهند، اگرچه پارامترهای ضریب نرخ واکنش مناسب، احتمالا تابع نسبت هم ارزی هستند. این سینتیک‌ها غالباً H_2 و CO را درنظر نمی‌گیرند، در نظرگرفتن آن‌ها نیاز به حداقل 3 مرحله واکنش دارد، اما سینتیکی که شامل این مراحل باشد بازهم قله CO را بطور جدی کم پیش‌بینی می‌کند [4]. در مرجع [4] با ارجاع به [26] اشاره شد که برخی مدل‌های واکنش کلی یا شبه-کلی[2] که پیش از آن ارائه شده بود، برای یک خاصیت ویژه‌ی شعله بهینه هستند، برای مثال مدل [2] برای سرعت شعله یا مدل [27] برای پروفیل دما؛ و بسیاری از این کارها و کارهای مشابه، در برخی وجوه کارآمد نیستند. در نتیجه‌گیری‌های ایشان قید شد که علت کم دقتی غالب مدل‌ها، می‌تواند ساده‌سازی‌های غیرواقعی سینتیک‌های شیمیایی باشد و گاهی بخاطر این است که مدل‌ها براساس اندازه گیری‌های انجام شده در شرایط آشفته بوده‌اند؛ با توجه به تاثیر زیاد نوسانات اغتشاشی، آن اندازه‌گیری‌ها نمی‌تواند یک پایه‌ی قابل اعتمادی برای ساختن سینتیک‌های کلی باشد. عبدالله [26] نشان داد که آن محدودیت‌ها در نرخ تولید CO و H_2 مشهودترند. بیشتر مدل‌های موجود در تخمین CO و H_2 در شعله، محدودیت‌هایی دارند و مقادیر خطا حتی تا 100٪ است [4].

[1] Jones and Lindstedt
[2] Quasi-global

جدول 2 پارامترهای ضرایب نرخ واکنش و مرتبه واکنش‌های سینتیک WD2 [2]

Table 2 Reaction Rate Coefficients Parameters and reaction orders of WD2 [2]

مرتبه‌های واکنش	E (cal/mol)	b	A (K^{-b} $(cm^3/mol)^{r-1}s^{-1}$)	واکنش
$[CH_4]^{-0.3}$ $[O_2]^{1.3}$	48400	0	2.8E9	(R- 2)
$[CO][H_20]^{0.5}$ $[O_2]^{0.25}$	40000	0	1e14.6	(R- 3)
$[CO_2]$	40000	0	5e8	(R- 3-rev)

جونز و لیندستد [4] با الگوگیری از کارهای پترز، برای مثال [28]، در کاهش روش‌مند[3] مکانیزم واکنش‌های تشریحی، بگونه‌ای که رادیکالی باقی نماند، سینتیکی که نواقص کمتری نسبت به انواع سابق داشته و از نظر شبیه‌سازی عددی دارای قابلیت همگرایی مناسبی باشد، ارائه نمودند. این سینتیک برای شعله‌های پیش‌مخلوط و غیرپیش‌مخلوط سوخت‌های آلکان از متان تا بوتان ارائه شد و در شعله‌های متان نتایج خوبی داد. این سینتیک دارای 2 مرحله شکست سوخت[4] توسط O_2 و H_2O، و تولید CO و H_2 است. این 2 گونه به ترتیب با H_2O و O_2 به صورت معکوس‌پذیر واکنش می‌دهند و تولید CO_2، H_2 و H_2O می‌کنند. 4 واکنش مذکور برای سوخت متان مطابق واکنش‌های (R- 4) تا (R- 7) می‌باشند.

$$CH_4 + 0.5\ O_2 \rightarrow CO + 2H_2 \qquad \text{(R- 4)}$$
$$CH_4 + H_20 \rightarrow CO + 3H_2 \qquad \text{(R- 5)}$$
$$CO + H_20 \leftrightarrow CO_2 + H_2 \qquad \text{(R- 6)}$$
$$H_2 + 0.5\ O_2 \leftrightarrow H_20 \qquad \text{(R- 7)}$$

در این مکانیزم نسبت به مکانیزم 2 مرحله‌ای، گونه H_2 و یک مرحله واکنش متان با آب و یک مرحله اکسیداسیون H_2 اضافه شده و اکسیداسیون CO با آب انجام شده است. مطابق مطالب [1] درنظر نگرفتن H_2 باعث بیش از حد پیش بینی کردن دمای آدیاباتیک شعله می‌شود. پارامترهای ضرایب نرخ واکنش و مرتبه واکنش‌ها، مطابق مرجع [4] در جدول 3 آمده است. برای تبدیل واحد ضریب پیش‌توانی به قالب اپن‌فوم، این ضریب بر $10^{3(r-1)}$ تقسیم شد که r مرتبه واکنش کلی است. برای واکنش (R- 7)، در جدول 3، 2 حالت ارائه شد. حالت اول به علت دارا بودن مقدار 1- برای مرتبه واکنش نسبت به آب، در سلول‌های محاسباتی، که غلظت نزدیک به صفر از آب دارند باعث مقادیر نامحدود نرخ واکنش [2] و واگرایی عددی می‌شود، لذا مقادیر حالت دوم ارائه شد که دارای توان غلظت منفی نیست اما در نواحی رقیق دارای دقت کمتری است [4]. البته برای حل این مشکل، راه دیگری هم وجود دارد که در کار [24] ارائه شد.

2-1-4- سینتیک 4 مرحله‌ای کیم[5]

این سینتیک در [1] بر پایه‌ی مکانیزم JL و با تغییراتی در واکنش‌های اکسیداسیون CO و H_2 ارائه گردید که دارای واکنش‌های (R- 8) تا (R- 11) است. از افتراقات این مدل و مدل JL یک‌طرفه بودن واکنش‌های اکسیداسیون CO و H_2 است. در مرجع مذکور مکانیزم مربوط به این 2 واکنش از مراجع دیگری آورده و ترکیب شده است. واکنش (R- 10) نسبت به واکنش متناظر خود یعنی (R- 6) بکلی متفاوت بوده و شناخته‌شده‌تر است. تفاوت واکنش‌های (R- 11) و (R- 7) علاوه‌بر برگشت‌ناپذیر بودن، در پارامترهای ضریب نرخ است. کیم [1] برای سنجش سینتیک فوق، از نتایج تجربی شعله

[3] Systematically reducing
[4] Fuel break down
[5] Kim et al.

جدول 3 پارامترهای ضرایب نرخ واکنش و مرتبه واکنش‌های سینتیک JL [4]

Table 3 Parameters of Rate Coefficients and reaction orders of JL [4]

مرتبه‌های واکنش	E (cal/mol)	b	A (K^{-b} $(cm^3/mol)^{r-1}$ s^{-1})	واکنش
$[CH_4]^{0.5}$ $[O_2]^{1.25}$	30000	0	4.4e13.25	(R- 4)
$[CH_4][H_20]$	30000	0	3e11	(R- 5)
$[CO][H_20]$	20000	0	2.75e12	(R- 6)
$[H_2]^{0.5}$ $[O_2]^{2.25}$ $[H_2O]^{-1}$	40000	-1	2.5e18.25	(R- 7)
$[H_2]^{0.25}$ $[O_2]^{1.5}$			6.8e17.25	

غیرپیش‌آمیخته ساندیا دی[1] استفاده کرد و مشاهده نمود که با استفاده از روش EDC، در تخمین غلظت CO و H_2 نسبت به مکانیزم JL دقیق‌تر است و مدل JL این مقادیر را در نواحی زیادی از میدان، بیشتر از مقدار تجربی پیش‌بینی می‌کند، گرچه مدل JL در تخمین دما، برتری دارد. علت انتخاب این مکانیزم در پژوهش حاضر، نتایج بهتر آن نسبت به JL در تخمین گونه‌ها مطابق نتایج [1] و نیز بازگشت ناپذیر بودن و عدم نیاز به محاسبات مربوط به بازگشت واکنش‌ها است. همچنین واکنش CO با O_2 (R- 10) همانگونه که در واکنش (R- 3) نیز وجود دارد، نسبت به واکنشش با آب (R- 6) شناخته شده‌تر است.

$$CH_4 + 0.5\ O_2 \rightarrow CO + 2H_2 \qquad \text{(R- 8)}$$

$$CH_4 + H_20 \rightarrow CO + 3H_2 \qquad \text{(R- 9)}$$

$$CO + 0.5\ O_2 \rightarrow CO_2 \qquad \text{(R- 10)}$$

$$H_2 + 0.5\ O_2 \rightarrow H_20 \qquad \text{(R- 11)}$$

پارامترهای ضرایب نرخ واکنش و مرتبه‌ی واکنش‌های فوق مطابق مرجع [1] در جدول 4 آمده است. شایان ذکر است در اصلاح مکانیزم‌ها باید با بررسی آنالیز حساسیت[2]، واکنش‌ها و پارامترهای با تاثیر بالا را شناسایی کرد که در [29] به آن پرداخته شده است.

2-2- برهم‌کنش آشفتگی و احتراق

اندرکنش آشفتگی و احتراق پدیده بسیار مهمی است و باید مدل‌های با دقت مناسب برای آن درنظر گرفت، در غیراین‌صورت می‌تواند باعث نتایج نادقیق شود. از جمله مدل‌های رایج برای مدل‌سازی این پدیده می‌توان به مدل‌های EBU، EDM، EDC و PaSR که بر پایه‌ی شکست یا اضمحلال ادی‌های آشفته هستند، اشاره کرد.

در روش EBU فرض می‌شود که شیمی نقش صریحی در نرخ واکنش‌ها دارا نیست و نرخ واکنش متوسط عمدتا توسط حرکت‌های آشفته کنترل می‌شود. اگرچه می‌توان بطور ترکیبی با روش آرنیوس نیز از آن استفاده کرد تا اثرات سینتیک وارد شود [19]. در روش EDC فرض می‌شود، سلول‌های محاسباتی به 2 قسمت ریزساختار[3] و سیال اطراف تقسیم می‌گردد و واکنش‌های شیمیایی فقط در ریزساختارها، که محل اضمحلال گردابه‌ها است، روی می‌دهد. این ریزساختارها در برخی انواع مدل EDC دارای فرض واکنش‌گاه کاملا آمیخته[4] هستند [30]. در کار حاضر برای مدل‌سازی این پدیده، از مدل واکنش‌گاه آمیخته‌ی جزئی PaSR استفاده شد.

2-2-1- روش PaSR

این مدل بر مبنای مدل EDC شکل گرفت و هر سلول محاسباتی به دو ناحیه غیرواکنشی و واکنشی همگن تقسیم می‌شود [31]. ناحیه واکنشی به‌صورت

[1] Sandia flame D
[2] Sensitivity analysis
[3] Fine structure
[4] Perfectly stirred reactor (PSR)

جدول 4 پارامترهای ضرایب نرخ واکنش و مرتبه واکنش‌های سینتیک کیم [1]

Table 4 Parameters of Rate Coefficients and reaction orders of Kim et al. [1]

مرتبه‌های واکنش	E (cal/mol)	b	A (K^{-b} $(cm^3/mol)^{r-1}$ s^{-1})	واکنش
$[CH_4]^{0.5}$ $[O_2]^{1.25}$	30000	0	4.4e13.25	(R- 8)
$[CH_4][H_20]$	30000	0	3.1e11	(R- 9)
$[CO][O_2]^{0.3}[H_20]^{0.5}$	16000	0	2.5e10.4	(R- 10)
$[H_2][O_2]^{0.5}$	35000	0	7.9e11.5	(R- 11)

واکنش‌گاه کاملا آمیخته در نظر است [32]. در شکل 1 طرحواره‌ای از یک سلول محاسباتی در مدل PaSR که به‌صورت یک واکنش‌گاه آمیخته‌ی جزئی فرض شده، مشاهده می‌شود. C_0 متوسط غلظت ورودی به سلول، C غلظت نامعلوم در ناحیه واکنشی، C_1 متوسط غلظت در خروجی سلول و κ^* کسر حجمی مخلوط واکنشی است [33]. در این مدل برای محاسبه کسر واکنشی سلول محاسباتی، از رابطه (8) استفاده می‌شود [34,31]. $\tau_{\rm ch}$ و $\tau_{\rm mix}$ به ترتیب مشخصه زمانی واکنش شیمیایی و آشفتگی هستند و از روابط (9) و (10) بدست می‌آیند [35,31].

$$\kappa^* = \frac{\tau_{\rm ch}}{\tau_{\rm mix} + \tau_{\rm ch}} \qquad (8)$$

$$\frac{1}{\tau_{\rm ch}} = \max\left\{\frac{-\dot{\omega}_{\rm F}}{\rho Y_F}, \frac{-\dot{\omega}_{\rm O_2}}{\rho Y_{\rm O_2}}\right\} \qquad (9)$$

$$\tau_{\rm mix} = C_{\rm mix}\sqrt{\frac{\mu_{\rm eff}}{\rho\varepsilon}} \qquad (10)$$

$\tau_{\rm ch}$ برای گونه‌های محدود کننده[5] محاسبه می‌شود. Y_F کسر جرمی سوخت و $\mu_{\rm eff}$ مجموع ویسکوزیته مولکولی و ویسکوزیته آشفتگی است. $C_{\rm mix}$[6] ثابت نرخ اختلاط است و مقادیر آن در بازه 0.3-0.001 پیشنهاد شده است [32]. با افزایش آشفتگی نیاز به مقادیر کوچک C_{mix} است [36]. در این روش نرخ خالص تولید گونه i مطابق رابطه (11) از ضرب κ^* در نرخی که توسط رابطه آرنیوس محاسبه شده است بدست می‌آید [37].

$$\dot{\omega}_i = \kappa^* \dot{\omega}_{i,\rm Arr} \qquad (11)$$

3- تشریح مسأله نمونه

این مسأله، یک محفظه احتراق استوانه‌ای افقی با قطر 0.5 متر و طول 1.7 متر است. سوخت و هوا به صورت غیرپیش‌آمیخته و از طریق 2 لوله استوانه‌ای هم‌مرکز و منطبق بر خط مرکزی محفظه، وارد می‌شوند. در شکل 2، ابعاد محفظه دیده می‌شود. لازم به ذکر است در کار حاضر برای برقراری بهتر شرایط مرزی توسعه یافته در خروجی، یک قسمت استوانه‌ای به طول 0.5 متر به انتهای محفظه متصل شد.

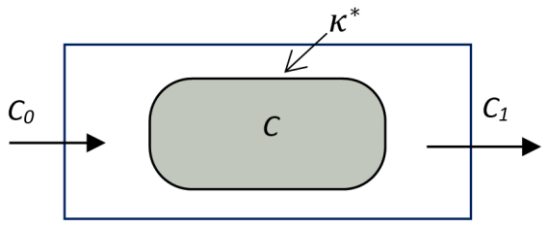

Fig. 1 Cell structure in partially stirred reactor model, PaSR [32]

شکل 1 ساختار یک سلول محاسباتی در روش واکنش‌گاه آمیخته‌ی جزئی [32]

[5] Limiting species
[6] mixing-rate constant

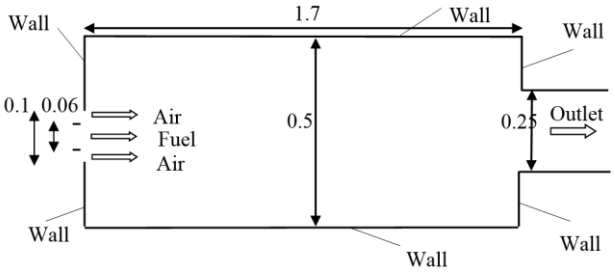

Fig. 2 Dimensions of case study geometry (m) [17]

شکل 2 ابعاد هندسه مسأله نمونه (ابعاد به متر) [17]

سوخت شامل 90% متان و 10% نیتروژن و هوا شامل 76% نیتروژن، 23% O2 و 1% بخار آب است. دبی هوا و سوخت به ترتیب برابر 0.186 و kg/s 0.0125 و سرعت آن‌ها 36.29 و m/s 7.76 است. دمای هوا و سوخت به ترتیب 323.15 و 313.15 کلوین است [12]. عدد رینولدز با مشخصات هوای ورودی حدود 80000 است. فرض شد قسمت استوانه‌ای انتهایی، به اتمسفر تخلیه شود و شرط مرزی گرادیان صفر برای سرعت، دما و گونه‌ها در مرزهای این ناحیه منظور شد. روی دیوار از شرط عدم‌لغزش، دمای 393.15 کلوین، گرادیان صفر برای گونه‌ها و توابع دیواره[1] برای متغیرهای k ، ε و α_t استفاده شد. شدت آشفتگی در ورودی هوا و سوخت 5% و برای ایجاد اشتعال، دمای اولیه میدان 1800 کلوین منظور گردید.

ترسیم هندسه و شبکه‌بندی با نرم‌افزار گمبیت انجام شد. شبکه‌بندی در کنار دیوارها و در مسیر جریان هوا و سوخت ریزتر شد. در نهایت، نتایج با شبکه‌های دارای حدود 1.5 میلیون سلول و 3 میلیون سلول، هر دو 6 وجهی سازمان‌یافته، تقریباً یکسان شد و استقلال از شبکه بدست آمد. نمایی از هندسه ترسیم شده‌ی 3 بعدی در شکل 3 آمده است.

برخی ثوابت مورد استفاده در این شبیه‌سازی در جدول 5 آمده است. برای حل این مسأله از حلگر ناپایای رآکتینگ‌فوم[2] (از حل‌گرهای پرکاربرد اپن‌فوم در جریان احتراقی) استفاده شد. این مجموعه کد با زبان برنامه‌نویسی C++ نوشته شده است. جهت اعمال تابش، اصلاحاتی در این حلگر انجام و حلگر رآکتینگ‌ردفوم[3] ساخته شد.

4- نتایج عددی

در ترسیم نمودارهای نتایج، در اکثر موارد از نتایج محور اصلی محفظه و در موارد لازم، از نتایج راستای شعاعی استفاده شد. شبیه‌سازی با مدل JL بخاطر دقت بیشتر، به عنوان حالت شبیه‌سازی مبنا انتخاب شد. شایان ذکر است، داده‌های تجربی تا فاصله 1.3 m از ورودی در دسترس است. در صحت‌سنجی، مقدار باند عدم‌قطعیت[4] اندازه‌گیری‌های آزمایشگاهی را باید در نظر گرفت [29] که در کار تجربی مورد نظر، مقادیر آن‌ها قید نشده است. عدم‌قطعیت در پیش‌بینی پدیده‌ها از 3 عامل ناشی می‌شود، محدودیت در اطلاعات از پدیده فیزیکی[5]، عدم‌قطعیت مدل و آزمایشی که مدل با آن سنجیده (کالیبره) می‌شود[6] و عدم‌قطعیت عددی[7] [29].

زمان محاسبات با افزایش تعداد مراحل سینتیک، افزایش یافت و در بین سینتیک‌های 4مرحله‌ای، مدل کیم زمان محاسبات کمتری داشت.

[1] Wall functions
[2] reactingFoam
[3] reactingRadFoam
[4] Error bar or uncertainty band
[5] Model form error
[6] Model input uncertainty
[7] Numerical uncertainty

Fig. 3 Designed geometry of combustion chamber

شکل 3 هندسه ترسیم شده محفظه احتراق

جدول 5 برخی ثوابت مورد استفاده در شبیه‌سازی

Table 5 Some constants used in the simulation

C_{mix}	Sc_t[8]	Le[9]	Pr_t[10]
0.1	1	1	1

در سینتیک‌های تک مرحله‌ای مورد نظر در کار حاضر، شعله پس از شکل‌گیری، از محفظه خارج شد، علت این اتفاق می‌تواند نزدیک بودن شعله به خروجی محفظه بخاطر برخاستگی باشد که مکانیزم‌های یک مرحله‌ای با توجه به اختلاف زیادی که با مکانیزم‌های تفصیلی و ساده شده و حتی کلی دارند، نتوانستند شعله را در یک‌سوم انتهایی محفظه نگه‌دارند. در مکانیزم‌های دیگر، سوخت به محض ورود به محفظه‌ی دما بالا، محترق شد و شعله به سمت پایین دست حرکت نمود و در مکانی با فاصله از ورودی، استقرار یافت. بردارهای سرعت و توزیع مؤلفه محوری در صفحه میانی، و بردارها در ناحیه بازچرخشی کوچک، در حالت شبیه‌سازی مبنا در شکل 4 آورده شد.

بردارهای سرعت نشان‌دهنده عریض‌شدن جت مواد اولیه و وجود ناحیه بازچرخشی با طول زیاد است. طول ناحیه بازچرخشی، در مدل JL برابر 1.37 m، در مدل کیم برابر 1.27 m و در مدل 2مرحله‌ای برابر 1.32 m است.

توزیع مؤلفه محوری سرعت، مقادیر منفی را در نواحی بازچرخشی و نیز در نزدیکی ورودی سوخت نشان می‌دهد. برای صحت سنجی جریان، در شکل 5، مقادیر مؤلفه‌ی محوری سرعت روی محور اصلی محفظه با مقادیر آزمایشگاهی، که در مرجع [17] یافته شد، مقایسه گردید. تمام سینتیک‌ها روند سرعت و مکان بیشینه سرعت محوری را به درستی پیش‌بینی می‌کنند. مؤلفه محوری سرعت ابتدا بخاطر ایجاد بازچرخش مقابل ورودی سوخت، کاهش یافته و سپس بخاطر ورود جریان پرسرعت هوا به جریان سوخت، افزایش می‌یابد، پس از آن بدلیل افزایش قطر جت مواد واکنش‌گر، مجددا سرعت محوری کاهش می‌یابد و در ناحیه شعله بخاطر آزاد شدن انرژی شیمیایی دراثر احتراق، یک جهش افزایشی دارد که با طی مسافت کوتاهی مجددا به سرعت پیش از شعله برمی‌گردد و روند کاهش یافتن را ادامه می‌دهد و درنهایت با ورود به مسیر خروجی، با کاهش سطح مقطع، افزایش سرعت رخ می‌دهد.

در مجموع نتایج عددی مکانیزم‌های مختلف تا فاصله 0.55 m از ورودی یکسان است و از این ناحیه به بعد اختلاف مقادیر رخ می‌دهد. عدم پیش‌بینی دقیق حجم ناحیه بازچرخشی می‌تواند یک دلیل برای این اختلاف باشد، زیرا حجم این ناحیه اگر دقیق پیش‌بینی نشود باعث حجم نادقیق جت ورودی و در نتیجه سرعت نادقیق می‌شود. خطای متوسط مؤلفه افقی سرعت در مدل JL، کیم و 2مرحله‌ای به ترتیب 32.9%، 33.3% و 37.4% است. خطای اندازه‌گیری‌های تجربی[11] باید در صحت سنجی درنظر گرفته شود [29].

[8] Turbulent schmidt number
[9] Lewis number
[10] Turbulent prandtl number
[11] Experimental uncertainty

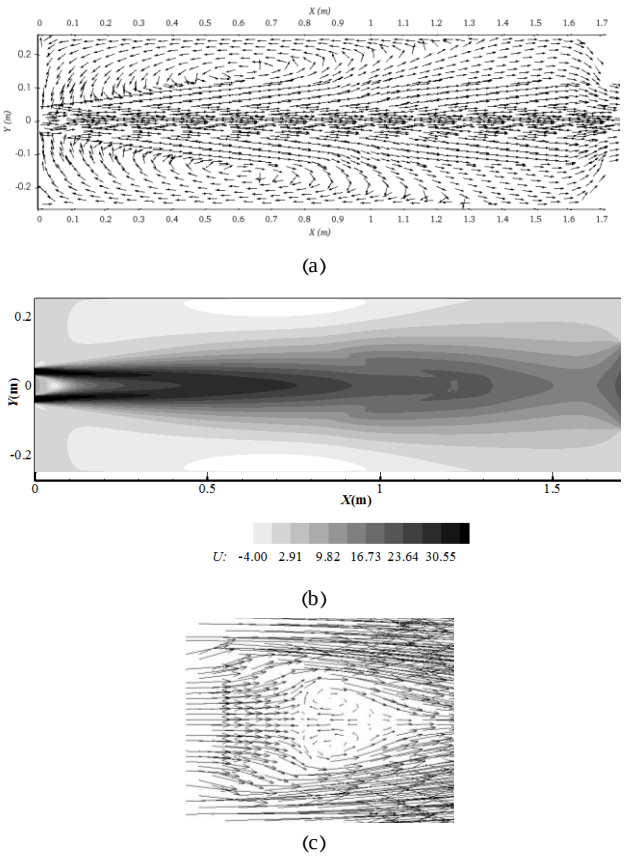

Fig. 4 Velocity in center plane (a) vectors without scaling (b) distribution of axial veloity (c) vectors at forward of fuel inlet (small recirculation zone)

شکل 4 سرعت در صفحه میانی در حالت مبنا، (a) بردارها، (b) توزیع مؤلفه محوری، (c) بردارها در ابتدای ورود سوخت (ناحیه بازچرخشی کوچک)

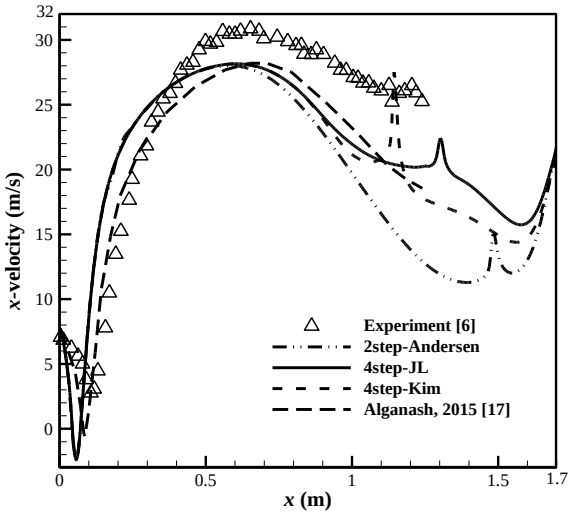

Fig. 5 Axial Velocity along center line

شکل 5 مؤلفه افقی سرعت روی محور اصلی محفظه احتراق

مدل JL و کیم نسبت به مدل 2مرحله‌ای به ترتیب 4.5% و 4.08% خطا را کاهش می‌دهند. در مجموع مکانیزم JL دارای دقت بالاتری است، مدل کیم در ناحیه واکنش دارای جهش زیادی در مقدار مؤلفه سرعت است، مدل 2مرحله‌ای پس از نقطه 1.3 m که نتایج تجربی در دسترس نیست، افت زیادی پیدا می‌کند. مقدار سرعت سوزش[1] (سرعت ورود واکنش‌گرها به شعله [3]) در مدل‌های JL، کیم و 2مرحله‌ای به ترتیب 20.18، 20.59 و 11.6 متربرثانیه است. شعله در مکانی استقرار می‌یابد که سرعت سوزش و سرعت جریان گاز با هم برابر باشند، در غیراین‌صورت شعله حرکت خواهد کرد؛ مشابه حالت سینتیک تک مرحله‌ای که شعله از محفظه خارج شد. سرعت محصولات در مکان بیشینه دمای محور اصلی، در مدل‌های کیم، JL و 2مرحله‌ای به ترتیب 27.5 m/s، 22.4 m/s و 15.2 m/s است. مطابق شکل 5 هر مکانیزمی که محصولات آن، با سرعت بیشتری از شعله خارج شده‌اند، در مکان بالادست‌تری استقرار یافته است. هرچه مقدار شتاب جریان گاز در این نقطه بیشتر باشد، مطابق قانون عمل و عکس العمل، می‌تواند شعله را بیشتر به عقب براند و لذا مکان شعله در مکانیزم‌های مختلف متفاوت شده است. همچنین با توجه به استقرار شعله‌ها در یک‌سوم انتهایی محفظه، سرعت بالاتر خروج محصولات از شعله و برخورد به دیواره انتهایی محفظه، می‌تواند باعث عقب‌تر رفتن شعله گردد. جهش ایجاد شده در سرعت، حاصل از آزاد شدن انرژی شیمیایی بواسطه‌ی احتراق در این نقطه است که باعث افزایش سرعت و دما در این موضع می‌گردد. علت تفاوت قابل توجه مقادیر سرعت در این نقطه، تفاوت در پارامترهای سینتیکی است. لذا اگر با تنظیم ضرایب پیش‌توانی، مقدار این سرعت در مدل کیم، کاهش و در مدل 2مرحله‌ای افزایش یابد، مکان شعله‌ها بهبود می‌یابند.

یک تفاوت بین نتایج شبیه‌سازی و تجربی، وجود مقادیر منفی مؤلفه سرعت در ناحیه‌ای کوچک در نزدیکی نازل سوخت است که در نتایج تجربی دیده نشده است، این مقدار منفی در برخی کارهای عددی مشابه دیده شد از جمله [17,14]، که نتایج [17] در شکل 5 آورده شده است، اگرچه این ناحیه در برخی شبیه‌سازی‌های 2 بعدی دیده نشد [12,7]. این مقدار منفی نشان از وجود ناحیه بازچرخشی کوچک در ناحیه ابتدایی ورود سوخت دارد (در هر 3 مکانیزم در فاصله 5.5 cm از ورودی)، که در مرجع [14] علت وقوع آن، انبساط محفظه و سرعت زیادتر هوا نسبت به سوخت دانسته شد، که می‌تواند باعث اختلاط بهتر هوا و سوخت شود، این ناحیه در شکل 4 حالت c نمایش داده شد. عدم وجود این ناحیه در مقادیر اندازه‌گیری شده، احتمالا بخاطر کوچک بودن این ناحیه و نبود حسگر در این ناحیه است و یکی از دلایل بالا بودن خطای متوسط، مربوط به دیده نشدن این ناحیه در نتایج تجربی است.

مطابق نمودارهای شکل 5، افقی نشدن نمودار سرعت در خروجی محفظه، نشان می‌دهد که شرط مرزی توسعه یافتگی هیدرودینامیکی که بطور رایج در خروجی محفظه احتراق به عنوان شرط مرزی انتخاب می‌شود در اینجا بخاطر تنگ شدن دهانه خروجی، صحیح نخواهد بود و برای اعمال کردن این شرط مرزی یک قسمت به انتهای محفظه اضافه شد.

توزیع دما در محفظه 3 بعدی و روی صفحه میانی محفظه، در شکل 6 برای شبیه‌سازی مبنا ترسیم گردید. هلال شعله و محل بیشینه دما، با فاصله حدود 1 m از ورودی قرار دارد که این نشان دهنده برخاستگی زیاد شعله، بیش از 1 m است (ارتفاع برخاستگی[2] [3]). پیش‌بینی می‌شود برخاستگی شعله بخاطر سرعت زیاد هوا نسبت به سوخت باشد که شعله را به پایین دست حرکت می‌دهد. مطابق کانتور دما و نیز کانتور و بردارهای سرعت در شکل 4، اثرات خاصی از عدم تقارن در نتایج دیده نمی‌شود.

برای صحت‌سنجی، نمودار دما روی محور اصلی محفظه در شکل 7 ترسیم شد. مطابق شکل 7 تغییر سینتیک اثر جدی بر مقدار و مکان دمای بیشینه دارد، این مکان تا حدودی نشان دهنده محل شعله است. مدل JL

[1] Burning velocity

[2] Lift off height

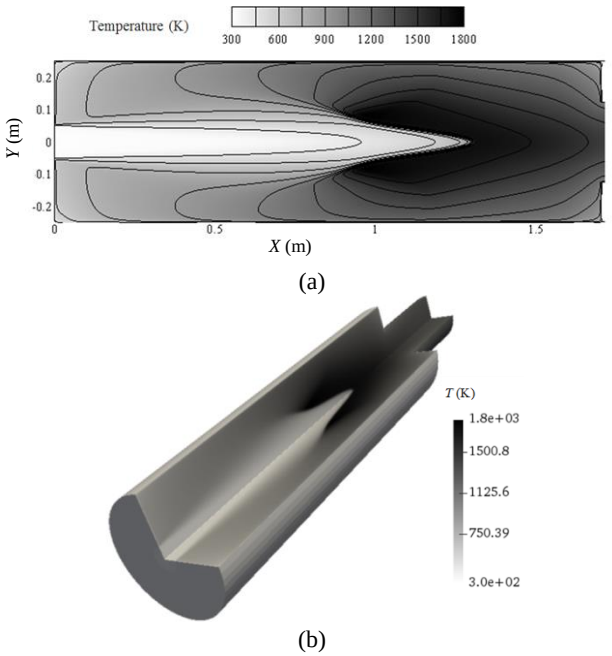

Fig. 6 Temperature distribution for base mode (a) at central plane (b) clipped 3D furnace

شکل 6 توزیع دما در حالت مبنا (a) در صفحه میانی محفظـه احتـراق (b) محفظـه 3 بعدی برش خورده

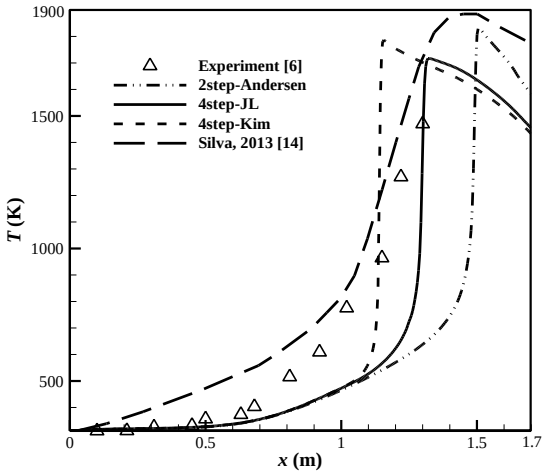

Fig. 7 Temperature along center line

شکل 7 دما روی محور اصلی محفظه احتراق

نسبت به مدل‌های دیگر دمای بیشینه کمتری تخمین می‌زند و در مجموع رفتار طبیعی‌تر و نزدیک‌تری به نتایج تجربی دارد. مدل‌های JL، کیم و 2مرحله‌ای محل دمای بیشینه را به ترتیب در فاصله 1.32، 1.16 و 1.51 m از ورودی بازسازی کردند. این اختلاف مکان بین مدل‌های کیم و JL، روی محور اصلی رخ داد و در مکان‌های دیگر مثل لبه‌های هلال شعله، اختلاف مکان بین 2 سینتیک 4مرحله‌ای نامحسوس بود. در مدل کیم نسبت به JL، فاصله فرورفتگی هلال شعله از لبه‌هایش کمتر شد.

مخلوط واکنشی، ارتفاع برخاستگی را درحال پیش‌گرمایش طی می‌کند تا به ناحیه شعله وارد شود. روند افزایش دما در نتایج عددی نسبت به تجربی ابتدا شیب کمتری داشت و در نزدیکی شعله شدید شد. شیب دما در ناحیه پیش‌گرمایش در کارهای مشابه که بطور متقارن محوری و با مدل‌های احتراقی EBU و EDC انجام شدند، بهتر تخمین زده شده است. در کار [14] که هندسه 3 بعدی منظور شد، نسبت به حالت متقارن محوری [10]، نتایج دما دارای دقت کمتری گزارش شد. نتایج مربوط به کار [14] در شکل 7، جهت مقایسه آورده شده است، دیده می‌شود که پیش‌گرمایش با سرعت خیلی بیشتری رخ داده است اما دارای 23.4% خطای متوسط است. پیش‌گرمایش، حاصل از هر 3 مکانیزم انتقال حرارت است، تابش از جانب شعله و محصولات داغ، جابجایی و تماس جریان بازچرخشی داغ با جت ورودی[1] و رسانش در جهت شعاعی. البته اثر جابجایی در پیش‌گرمایش مرکز جت، بطور غیرمستقیم است زیرا جریان داغ بازگشتی، وارد بخش‌های مرکزی جت نمی‌شود. خطای متوسط در مدل‌های JL، کیم و 2مرحله‌ای به ترتیب 16.7%، 20.3% و 21.9% است که با درنظر گرفتن عدم‌قطعیت در اندازه‌گیری‌ها، خطای قابل قبولی است و نسبت به نتایج [14] خطای کمتری دارد. بررسی‌های کار حاضر نشان داد روش ونلیر، نتایج بهتری نسبت به روش پادبادسو می‌دهد.

مطابق شکل 7 با توجه به افقی نشدن منحنی‌های دما، شرط مرزی گرادیان دمای صفر برای خروجی محفظه احتراق، صحیح نیست زیرا تنگ‌شوندگی خروجی، جریان را از حالت توسعه‌یافته‌ی حرارتی خارج می‌کند.

نمودار دما در راستای شعاعی در مکان x=1.312 m در شکل 8 بررسی شد که این مکان نزدیک به مکان بیشینه دما در مسیر محور اصلی محفظه در مدل JL است. با سینتیک 2مرحله‌ای بواسطه ناصحیح پیش‌بینی کردن مکان شعله، در این مکان اختلاف دما زیاد است، لذا از مقادیر نقطه بیشینه دمای این مکانیزم x=1.5 m نیز استفاده شد تا ارزیابی بهتری از توانایی این مکانیزم بدست آید. نتایج JL و کیم اختلاف خیلی کمی با یکدیگر دارند اما در مقایسه با نتایج تجربی، در محدوده‌ی نیمه اول شعاع، در روند تغییرات دما اختلاف دارند که علتش می‌تواند این باشد که در محور اصلی محفظه، قله دمای واقعی، مقداری پایین‌دست‌تر از مکان پیش‌بینی شده توسط مدل JL است، که از نتایج شکل 7 نیز همین نتیجه گرفته می‌شود.

مطابق نمودار، شعله‌ی واقعی، شکل هلالی مشابه نتایج شکل 6 دارد، زیرا افزایش دما در راستای شعاعی دیده می‌شود. خطای متوسط دمایی در مدل JL، کیم و 2مرحله‌ای (در مکان x=1.312 m) به ترتیب برابر 10.6%، 10.3% و 26.3% است. نکته جالب توجه، مکان بیشینه دمای کل محفظه است، در مکانیزم 2مرحله‌ای، مکان بیشینه دما روی محور اصلی است اما در مکانیزم‌های 4مرحله‌ای این نقطه در لبه‌های هلال شعله قرار دارد. مقدار بیشینه دما در مدل‌های JL، کیم و 2مرحله‌ای به ترتیب 1795، 1831 و 1833 کلوین است. مطابق شکل‌های 7 و 8 در نتایج تجربی موجود، مکان بیشینه دما، روی محور اصلی نیست.

برای صحت‌سنجی گونه‌ها، 4 گونه‌ی CH_4، O_2، CO و CO_2 بررسی شد. در شکل 9 نمودار کسر جرمی متان روی محور اصلی دیده می‌شود. افت کسر جرمی متان در این نمودار تا حدود یک متری، بخاطر واکنش نیست زیرا شعله در پایین‌دست قرار دارد بلکه حاصل از ورود جریان هوا به جریان سوخت است. افت شدید کسر جرمی در ورودی، بخاطر اختلاط با هوا در ناحیه بازچرخشی کوچک است. مکانیزم‌های مختلف در تخمین مصرف متان روند نزدیکی با نتایج آزمایشگاهی دارند. خطای متوسط در مدل JL، کیم و 2 مرحله‌ای به ترتیب 19.8%، 21.1% و 16% است که دقت قابل قبولی دارند. خطای مدل 2مرحله‌ای کمتر از مدل‌های 4مرحله‌ای است. در مدل‌های

[1] Entrainment

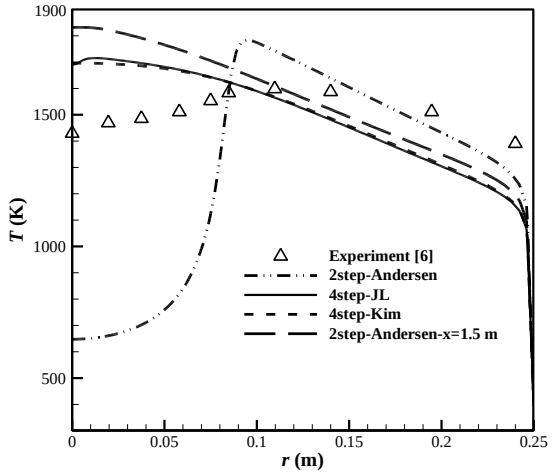

Fig. 8 Temperature profiles in radial direction at x=1.312 m

شکل 8 دما در راستای شعاعی در مکان x=1.312 m

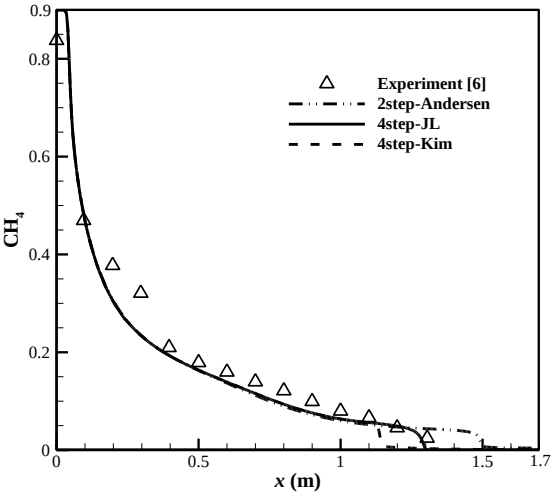

Fig. 9 CH_4 mass faction along center line

شکل 9 کسر جرمی متان روی محور اصلی محفظه احتراق

4 مرحله‌ای، متان زودتر از نتایج تجربی به اتمام می‌رسد. هر 3 مدل، مشابه روند نتایج تجربی، در خروجی مقدار نزدیک به صفر تخمین می‌زنند.

در شکل 10 نمودار کسر جرمی O_2 روی محور اصلی دیده می‌شود. O_2 در ابتدای ورود به محفظه، به شدت وارد جریان سوخت شده و طی مسافت 10 cm از مقدار صفر تا حدود 10% افزایش می‌یابد. روند افزایشی ادامه دارد تا اینکه بخاطر ورود محصولات از طریق جریان بازچرخشی به جت واکنش‌گرها و نفوذ گونه‌ها، مقدار کسر جرمی O_2 کم می‌شود و به شعله وارد می‌شود. کاهش کسر جرمی O_2 بعد از قله، بخاطر واکنش نیست زیرا در این ناحیه مطابق شکل 7 دما در نتایج عددی در حدود 400 کلوین است و در این دما احتمال احتراق کم است. روند کلی توسط همه سینتیک‌ها به خوبی پیش‌بینی شد. خطای متوسط مدل JL، کیم و 2مرحله‌ای به ترتیب 14%، 30% و 43% است. نتایج JL نسبت به 2مرحله‌ای 29% دقت بیشتری دارد.

در شکل 11 مقادیر کسر جرمی CO_2 روی محور اصلی محفظه ترسیم شد. در محل ورود سوخت بیش از 2% جرمی CO_2 وجود دارد که مراجع اشاره‌ای به وجود آن در مخلوط سوخت نکرده‌اند و هیچ یک از شبیه‌سازی‌های دیگر نتوانستند این مقدار را بدست آورند و هیچ بحثی هم روی علت وجود آن نشده است.

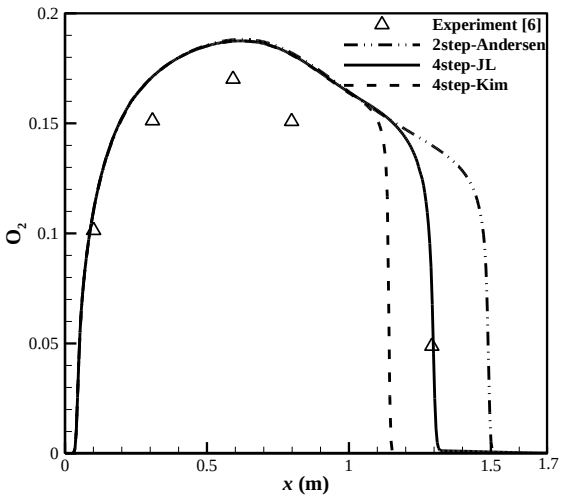

Fig. 10 O_2 mass faction along center line

شکل 10 کسر جرمی اکسیژن روی محور اصلی محفظه احتراق

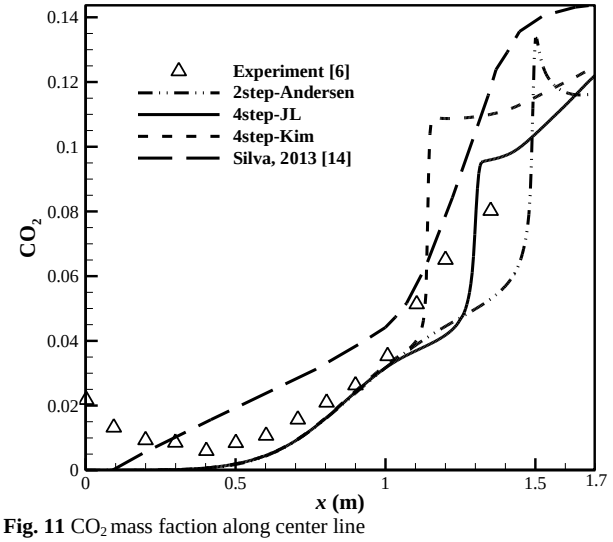

Fig. 11 CO_2 mass faction along center line

شکل 11 کسر جرمی CO_2 روی محور اصلی محفظه احتراق

تمام سینتیک‌ها تا فاصله 1.1 m رفتار مشابهی دارند. در خروجی، مقادیر تقریباً یکسانی از CO_2 خارج می‌شود. در بین مکانیزم‌های 4مرحله‌ای، نوع JL دقت بالاتری دارد. خطای متوسط مدل JL، کیم و 2مرحله‌ای به ترتیب برابر 55.6%، 58.2% و 56.8% است.

مقدار CO_2 در ورودی، باعث خطای قابل توجه شده[1] که بدون آن، دقت‌ها بیش از 15% افزایش خواهد یافت. با توجه به کلی بودن واکنش‌ها و درنظر نگرفتن بسیاری از واکنش‌های بنیادی، خطای تخمین CO_2 قابل قبول است. در بررسی آلاینده‌ها و گازهای گل‌خانه‌ای، آنچه دارای اهمیت اصلی است و باعث آلودگی محیط زیست می‌شود، مقدار خروجی است؛ مطابق شکل 11، روند نتایج تجربی، به سمت نتایج عددی در خروجی، تمایل دارد. برای بررسی بیشتر، نتایج [14] نیز ترسیم شد که دارای خطای متوسط 70.16% است که بیشتر از خطای متوسط کار حاضر می‌باشد.

در شکل 12 مقادیر CO روی خط اصلی محفظه دیده می‌شود. در مدل‌های 4مرحله‌ای، روند کلی و محل قله، خوب است. سینتیک 2مرحله‌ای بخاطر جلوتر پیش‌بینی کردن شعله، اختلاف مکانی با مقادیر تجربی دارد. خطای متوسط مدل JL، کیم و 2مرحله‌ای به ترتیب برابر 114%، 199% و

[1] Input uncertianty (Experimental uncertainty)

72% می‌باشد. بخشی از خطا ناشی از نادرست پیش‌بینی شدن محل شعله است. علت زیاد بودن خطا در محاسبه CO را می‌توان در توانایی کم مکانیزم‌های کلی در تخمین آن جستجو کرد [4]. مدل JL نسبت به مدل‌های دیگر مقدار CO را بیشتر تخمین می‌زند و دارای افت در قله است؛ بخاطر محدود بودن نتایج تجربی، نمی‌توان بطور قاطع در مورد مقدار قله اظهار نظر کرد. مدل کیم بخاطر عقب‌تر تخمین زدن شعله، اختلاف مکانی با نتایج تجربی داشته و بیشترین خطا را دارد. در خروجی محفظه، مقادیر مشابهی از CO خارج می‌شود که نتایج تجربی به سمت آن متمایل است.

با توجه به مقادیر ناچیز CO در مکانیزم‌های 4مرحله‌ای تا فاصله 1 m از ورودی، مشخص می‌شود که شدت واکنش متان در این قسمت خیلی کم است لذا حرارتی آزاد نخواهد شد پس علت افزایش دما تا این فاصله، در شکل 7، حاصل از حرارت واکنش نیست بلکه حاصل از انتقال حرارت است؛ لذا علت اختلاف دما با نتایج تجربی در شکل 7 دقیق تخمین نزدن تابش یا جابجایی یا نفوذ حرارتی است. شبیه‌سازی بدون تابش، در مراحلی از کار حاضر بررسی گردید و دیده شد که تا فاصله 1 m اثر قابل توجهی روی دمای محور اصلی ندارد، که در [12] نیز رویت شد. همچنین با توجه به تخمین بهتر دما در راستای شعاعی نسبت به راستای محوری مطابق شکل‌های 7 و 8، نتیجه‌گیری می‌شود خطای دما در بخش پیش‌گرمایش، از نادقیق وکم بودن نفوذ گرمایی در راستای شعاع ناشی شود که حاصل از ضریب نفوذ حرارتی است. کاهش عدد پرانتل آشفته که در معادله انرژی ظاهر می‌شود، می‌تواند یک راه برای تدقیق آن باشد.

با توجه به خطای کمتر در محاسبه O_2 و CO_2 در JL، اما خطای زیاد در CO بنظر می‌آید اگر در واکنش (R- 5) نرخ واکنش با تنظیم ضریب پیش‌توانی کاهش یابد، هم مقدار تولید CO کمتر و هم مقدار مصرف متان کندتر می‌شود و نتایج CO و CH_4 در سینتیک JL دقیق‌تر می‌گردد.

5- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در پژوهش حاضر، اثرات چند سینتیک شیمیایی کلی (شامل 1 مرحله‌ای، 2 مرحله‌ای و 4 مرحله‌ای JL و کیم) در برآورد رفتار شعله احتراق متان در یک محفظه احتراق افقی دارای شعله برخاسته، به روش عددی بررسی، مقایسه و

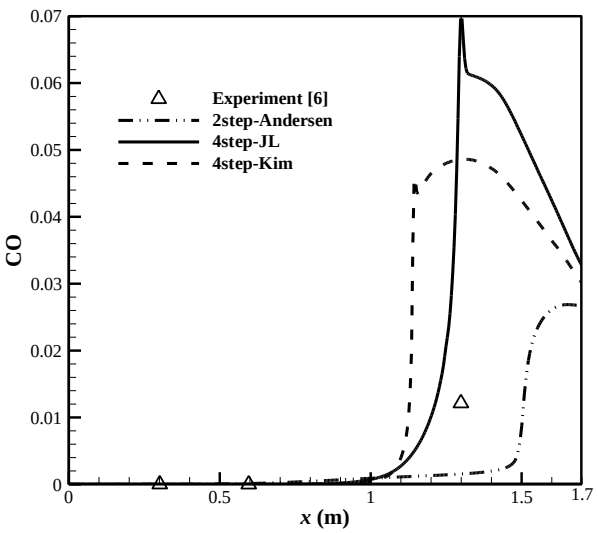

Fig. 12 CO mass faction along center line

شکل 12 کسر جرمی CO روی محور اصلی محفظه احتراق

صحت‌سنجی شد. این شبیه‌سازی توسط مجموعه کد اپن‌فوم با مدل احتراقی PaSR و بطور 3بعدی انجام شد. از اهداف این کار، مقایسه خطای سینتیک‌های مذکور در تخمین جریان، دما و گونه‌ها بود تا مشخص گردد هر کدام، در تخمین چه متغیرهایی دقت بیشتری دارند.

شایان توجه است که مکانیزم‌های کلی بخاطر ساده‌سازی‌هایی که در آن‌ها صورت گرفته است اصالتا دارای خطا هستند. در مجموع، افزایش مراحل سینتیک‌ها باعث افزایش دقت شد. مقایسه نتایج، نشان دهنده یکسان بودن مقادیر اکثر متغیرها، در دوسوم ابتدایی محفظه و تفاوت در ساختار حرارتی، شیمیایی و جریان در یک‌سوم انتهایی محفظه (محل شعله) می‌باشد. پس از صحت سنجی، بحث و بررسی، نتایج زیر بدست آمد.

- سینتیک شیمیایی 4مرحله‌ای JL در تخمین مکان شعله، سرعت، دما و گونه‌های O_2 و CO_2 دقت بالاتر و سینتیک 2 مرحله‌ای در تخمین گونه‌های CH_4 و CO دقت بالاتری دارد. سینتیک‌های 1مرحله‌ای قادر به حفظ شعله نبودند و شعله پس از تشکیل از محفظه خارج شد.
- بیشترین خطای متوسط تمام سینتیک‌ها در تخمین گونه‌ی CO بود، این مطلب توانایی کم سینتیک‌های کلی در تخمین این گونه را نشان می‌دهد.
- مقادیر آلاینده‌ها در خروجی محفظه، توسط مکانیزم‌های شیمیایی مختلف تقریباً یکسان پیش‌بینی شد. نتایج تجربی متمایل به این مقدار است.
- در بین 2 سینتیک 4 مرحله‌ای، در مجموع، مدل JL دقت بالاتر اما مدل کیم زمان محاسبات کمتری دارد، لذا در مسائلی که نتایج گذرا اهمیت ندارد، توصیه می‌شود برای تسریع در محاسبات، ابتدا از مدل‌های 2مرحله‌ای و سپس از مدل کیم استفاده و در نهایت به مدل JL تغییر داده شود.
- روند تغییرات متغیرهای مختلف، خوب پیش بینی شده و یک عامل مهم در اختلاف با مقادیر واقعی، محل شعله است. مقدار بیشینه دما و محل آن (محل شعله) وابستگی زیادی به سینتیک دارد. با توجه به ارتفاع برخاستگی بیش از1 m، مکان شعله نسبت به تغییر سینتیک، حساسیت زیادی دارد. در مجموع مدل کیم و JL شعله را عقب‌تر و مدل 2 مرحله‌ای شعله را جلوتر از محل واقعی بازسازی کردند.
- اثر تغییر سینتیک بر سرعت، نسبت به دما و گونه‌ها در فاصله کمتری از ورودی دیده و باعث تغییر در مکان شعله شده است. سرعت سوزش روی محور اصلی، بر محل شعله تاثیر مهمی دارد. با تنظیم ضرایب پیش‌توانی در سینتیک، می‌توان سرعت سوزش و متعاقبا مکان شعله را دقیق‌تر نمود.
- یک ناحیه بازچرخشی کوچک، در نزدیکی ورودی روی محور اصلی شکل گرفت که باعث اختلاط بهتر سوخت و اکسیدکننده می‌شود.
- شرط مرزی گرادیان صفر برای سرعت و دما در خروجی محفظه برقرار نیست و اعمال نمودن آن صحیح نخواهد بود.
- روش گسسته‌سازی ونلیر دقت بالاتری نسبت به روش پادبادسو دارد.
- کار حاضر که با مدل احتراقی PaSR انجام شد، در تخمین دما و CO_2 روی محور اصلی دارای دقت بیشتری نسبت به کار 3بعدی مشابه، [14]، که با ترکیب مدل‌های احتراقی EBU و آرنیوس انجام شده است، می‌باشد.
- یکی از نتایج این شبیه‌سازی 3 بعدی، متقارن بودن ساختار حرارتی، شیمیایی و جریان در این محفظه احتراق، با فرض کم اثر بودن گرانش، است. لذا شبیه‌سازی متقارن محوری برای مسائل مشابه توصیه می‌شود.
- در تمام سینتیک‌ها، پیش‌گرمایش واکنش‌گرها در ناحیه دوسوم ابتدایی محفظه کندتر از نتایج تجربی رخ داد زیرا نفوذ حرارتی در راستای شعاعی در این ناحیه کم پیش‌بینی شده است که برای بهبود آن، کاهش عدد پرانتل آشفته، پیشنهاد می‌شود.

6- مراجع

[1] J. Kim, U. Schnell, G. Scheffknecht, Comparison of different global reaction mechanisms for MILD combustion of natural gas, *Combustion Science and Technology*, Vol. 180, No. 4, pp. 565–592, 2008.

[2] C. Westbrook, F. Dryer, Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames, *Combustion Science and Technology*, Vol. 27, No. 1–2, pp. 31–43, 1981.

[3] S. Turns, *An Introduction to Combustion*, pp. 122-516, New York: McGraw-hill, 2000.

[4] W. Jones, R. Lindstedt, Global reaction schemes for hydrocarbon combustion, *Combustion and Flame*, Vol. 73, No. 3, pp. 233–249, 1988.

[5] J. Andersen, C. Rasmussen, T. Giselsson, P. Glarborg, Global combustion mechanisms for use in CFD modeling under oxy-fuel conditions, *Energy and Fuels*, Vol. 23, No. 3, pp. 1379–1389, 2009.

[6] D. Garreton, O. Simonin, Final results, *Proceedings of the First Workshop of Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces*, EDF–Ercoftac CFD Workshop, pp. 29–35, 1994.

[7] H. Magel, U. Schnell, K. Hein, Modelling of hydrocarbon and nitrogen chemistry in turbulent combustor flows using detailed reaction mechanisms, *3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems*, Heidelberg, 1996.

[8] H. C. Magel, U. Schnell, K. R. G. Hein, Simulation of detailed chemistry in a turbulent combustor flow, *Symposium (International) on Combustion*, Vol. 26, No. 1, pp. 67–74, 1996.

[9] A. Brink, C. Mueller, Possibilities and limitations of the eddy break up model, *Combustion and Flame*, Vol. 123, No. 1, pp. 275–279, 2000.

[10] C. Silva, H. Vielmo, F. Franca, Validation of a numerical simulation of the combustion of natural gas in a cylindrical chamber, *18th International Congress of Mechanical Engineering*, Ouro Preto, Brazil, November 6-11, 2005.

[11] A. Nieckele, M. Naccache, M. Gomes, J. Carneiro, A. Isnard, R. Serfaty, Numerical simulation of natural gas combustion process using a One-step and a two-step reaction, *Proceedings of ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, New Orleans, USA, November 17–22, 2002.

[12] C. V. Silva, F. H. R. Franca, , H. A. Vielmo, Analysis of the turbulent, non-premixed combustion of natural gas in a cylindrical chamber with and without thermal radiation, *Combustion Science and Technology*, Vol. 179, No. 8, pp. 1605–1630, 2007.

[13] B. Ronchetti, H. Vielmo, Modeling and simulation of turbulent non-premixed combustion in cylindrical furnace, 19th *International Congress of Mechanical Engineering*, Brazil, November 5-9, 2007.

[14] C. V. Silva, C. Segatto, A. De Paula, F. R. Centeno, F. Henrique, R. França, 3D analysis of turbulent non-premixed combustion of natural gas in a horizontal cylindrical chamber, *22st Brazilian Congress of Mechanical Engineering*, pp. 7741–7750, 2013.

[15] CFX User's Guide Solver Theory, ANSYS Inc., 2004.

[16] ANSYS Theory Guides, Release 16, ANSYS Inc., USA, 2015.

[17] B. S. A. Alganash, *Numerical Investigation of the Combustion Processes of Various Combustion Regimes*, PhD thesis, College of Science and Engineering, University of Glasgow, 2015.

[18] H. Versteeg, W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*, Second Edition, pp. 175-176, London: Pearson Education, 2007.

[19] T. Poinsot, D. Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*, Second Edition, pp. 8-217, Philadelphia: R.T. Edwards, 2005.

[20] GRI-Mech 3.0, The Combustion Laboratory at the University of California, Berkeley Department of Mechanical Engineering, 1999; http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html.

[21] J. Fenn, H. Calcote, Activation energies in high temperature combustion, *4th Symposium on Combustion, Baltimore*, Vol. 4, No. 1, pp. 231-239, 1953.

[22] P. Walker, C. Wright, Hydrocarbon burning velocities predicted by thermal versus diffusional, mechanisms, *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 74, No. 15, pp. 3769-3771, 1952.

[23] F. Dryer, I. Glassman, High-temperature oxidation of CO and CH4, *Symposium on Combustion*, Vol. 14, No. 1, pp. 987–1003, 1973.

[24] T. Coffee, On simplified reaction mechanisms by oxidation of hydrocarbon fuels in flames by Westbrook and Dryer, *Combustion Science and Technology*, Vol. 43, No. 5, pp. 333-339, 1985.

[25] J. Andersen, C. Rasmussen, T. Giselsson, P. Glarborg, Global combustion mechanisms for use in CFD modeling under oxy-fuel conditions, *Energy & Fuels*, Vol. 23, No. 3, pp. 1379–1389, 2009.

[26] A. Abdalla, D. Bradley, S. Chin, C. Lam, Global reaction schemes for hydrocarbon oxidation, *Oxidation Communications*, Vol. 4, No. 1, pp. 113–130, 1983.

[27] T. P. Coffee, A. Kotlar, , M. Miller, The overall reaction concept in premixed laminar steady-state flames 1. Stoichiometries, *Combustion and flame*, Vol. 54, No. 1, pp. 155–169, 1983.

[28] N. Peters, B. Rogg, *Lecture Notes in Physics*, pp. 308-331, Berlin: Springer-Verlag, 1985.

[29] H. Wang, D. Sheen, Combustion kinetic model uncertainty quantification, propagation and minimization, *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 47, No. 1, pp. 1-31, 2015.

[30] B. F. Magnussen, Modeling of NOx and soot formation by the eddy dissipation concept, *International Flame Research Foundation First Topic Oriented Technical Meeting*, Amesterdam, Netherlands, October 17-19, 1989.

[31] J. J. Chomiak, A. Karlsson, Flame liftoff in diesel sprays, *Symposium on Combustion*, Vol. 26, No. 2, pp. 2557–2564, 1996.

[32] N. Nordin, *Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion*, PhD Thesis, Göteborg, 2001.

[33] V. I. Golovitchev, J. Chomiak, Numerical modeling of high temperature air flameless combustion, *Proceedings of the 4th International Symposium on High Temperature Air Combustion and Gasification (HiTACG)*, Nov. 27-30, Rome, Italy, 2001.

[34] Y. Afarin , S. Tabejamaat, Effect of hydrogen on H2/CH4 flame structure of mild combustion using the LES method, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 38, No. 8, pp. 3447–3458, 2013.

[35] O. Marzouk, E. Huckaby, A comparative study of eight finite-rate chemistry kinetics for CO/H2 combustion, *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, Vol. 4, No. 3, pp. 331–356, 2010.

[36] D. Christ, Simulating the combustion of gaseous fuels, *6th OpenFoam Workshop Training Session*, pp. 13–16, USA, 2011.

[37] Y. Afarin, S. Tabejamaat, The effect of fuel inlet turbulence intensity on H2/CH4 flame structure of mild combustion using the LES method, *Combustion Theory and Modelling*, Vol. 17, No. 3, pp. 1–28, 2012.