Archive of SID

نشریه علمی- پژوهشی سوخت و احتراق
سال هشتم، شماره دوم، پاییز و زمستان ۱۳۹۴

انجمن احتراق ایران

شبیه‌سازی شعله نفوذی متان/ هیدورژن با استفاده از مدل‌های احتراقی فلیملت پایا و ناپایا

فاطمه چیتگرها[۱]، محسن دوازده امامی[۲] و محمد فرشچی[۳]

۱- کارشناس ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان (نویسنده مخاطب)، f.chitgarha@me.iut.ac.ir
۲- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، mohsen@cc.iut.ac.ir
۳- استاد، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، farshchi@sharif.edu

(دریافت: ۱۳۹۳/۲/۶، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۳/۱۲/۱۷، پذیرش: ۹۳/۱۲/۱۹)

چکیده: کاهش آلاینده‌های محیط زیست ناشی از احتراق در سیستم‌های نیرو محرکه یکی از چالش‌های اساسی محققان است. برای اطلاع از منابع این آلاینده‌ها، پیش‌بینی دقیق محصولات و دمای میدان احتراق امری ضروری است. به همین دلیل، در سال‌های اخیر، شبیه‌سازی جریان‌های احتراقی مغشوش مورد توجه واقع شده است. برای شبیه‌سازی این جریان ها به یک مدل احتراقی مناسب، نیاز است. مدل فلیملت، به‌دلیل ویژگی‌های متعدد ازجمله جداکردن واکنش‌های شیمیایی از میدان مغشوش، یکی از پرکاربردترین مدل‌های ارائه‌شده در مقالات است. همچنین، فرض حالت ناپایا در مدل‌سازی پدیده‌های شیمیایی کندی مانند تشکیل آلاینده‌ها نتایج بهتری نسبت به فرض حالت پایا پیش‌بینی می‌کند. هدف از این مقاله مشاهده کاربرد مدل فلیملت پایا و ناپایا در شبیه‌سازی شعله‌های نفوذی مغشوش بلاف بادی است. پیش‌بینی دما و کسرمخلوط متوسط محاسبه‌شده با استفاده از مدل فلیملت پایا، هم‌خوانی خوبی را با نتایج تجربی نشان می‌دهد. شبیه‌سازی‌های حالت پایا با استفاده از دو مکانیزم شیمیایی GRI3.0 و GRI2.11، کسرجرمی گونه NO را خیلی بیشتر از مقدار واقعی پیش‌بینی می‌کند. در عین حال، کسر جرمی گونه NO در مدل فلیملت ناپایا با استفاده از مکانیزم GRI2.11، با داده‌های تجربی همخوانی خوبی دارد. در نتیجه اثرات گذرایی در فرایندهای کندی مانند تشکیل NO باید درنظر گرفته شود.

کلیدواژگان: مدل فلیملت آرام، شعله نفوذی، مدل فلیملت ناپایا

مقدمه

در میان آلاینده‌های فراوان در یک محفظه احتراقی، NO_X ازجمله موادی است که نیازمند کنترل است. به‌منظور کاهش کسرجرمی NO_x، روش‌های احتراق جدیدی برای بهترکردن بازده احتراقی و کاهش آلاینده‌ها به‌کار گرفته می‌شوند. در سال‌های اخیر به‌منظور مدل‌سازی احتراق غیرپیش‌آمیخته آشفته، از مدل‌های فلیملت آرام[۱] [۱]، مدل انتقال تابع دانسیته احتمال[۲] [۲] و مدل لحظه‌ای مشروط بسته[۳] [۳] استفاده می‌شود. مدل فلیملت پایا به‌علت به‌کاربردن یک مکانیزم مناسب برای شرکت دادن سینتیک شیمیایی در داخل محاسبات شعله‌های غیرپیش‌مخلوط از دیگر روش‌های ذکرشده پرکاربردتر است. در مطالعه حاضر از مدل فلیملت آرام با تمرکز بر اثرات ناپایایی برای پیش‌بینی NO استفاده می‌شود.

1. SLFM
2. PDF
3. CMC

www.SID.ir

Archive of SID

مدل فلیملت آرام پدیده‌های پیچیده فیزیکی مانند جزئیات شیمیایی و تشکیل آلاینده‌ها را به‌وسیله جداکردن واکنش‌های شیمیایی از میدان آشفته درنظر می‌گیرد[۴]. در مدل فلیملت استاندارد از سه پارامتر کسرمخلوط میانگین $\tilde{Z}$، واریانس کسرمخلوط میانگین $\widetilde{Z''^2}$ و نرخ استهلاک اسکالر[۱] میانگین $\tilde{\chi}$ (میزان کرنش شعله) برای مشخص‌کردن حالت ترموشیمیایی محلی در جریان آشفته استفاده می‌شود. در مدل فلیملت پایا، از جمله وابسته زمانی صرف‌نظر شده و با فرض تغییرات آهسته نرخ استهلاک، بانک اطلاعاتی این پارامترها تولید می‌شود. با این حال، اگر نرخ استهلاک اسکالر به‌سرعت تغییر کند، جمله ناپایایی در معادلات فلیملت مهم می‌شود[۵].

پیچ و همکارانش بر روی یک شعله نفوذی هیدروژن/هوا نشان دادند که دما و کسر جرمی گونه‌های اصلی با استفاده از مدل فلیملت پایا به‌درستی پیش‌بینی می‌شوند، اما میزان NO_X بسیار بیشتر از داده‌های تجربی به‌دست می‌آید[۶]. از این‌رو آن‌ها به‌وسیله یک مدل فلیملت ناپایا، نتایج خود را بهبود بخشیدند. روش کاربردی پیچ و همکارانش از یک نوع مدل فلیملت ناپایای لاگرانژی بود. در این مدل، فلیملت‌ها در ورودی نازل وارد می‌شوند و به پایین‌دست جریان جابه‌جا می‌شوند. یک جمله، که مکان محوری فلیملت را به عمر فلیملت لاگرانژی مربوط می‌کند، برای انتگرال‌گیری معادلات فلیملت و در نتیجه برای محاسبه اثرات زمانی در ساختار فلیملت استفاده می‌شود. اما استفاده از این مدل تنها به جریان‌های سهموی[۲] محدود می‌شود. برای غلبه‌کردن بر این محدودیت، بارث و همکارانش از روش مدل اویلری ذره‌ای برای شبیه‌سازی یک محفظه‌ی احتراق توربین گازی استفاده کردند[۷]. در این مدل، کسر جرمی ذرات اویلری منطبق بر فلیملت، در مکان‌های ویژه‌ای، برطبق مقدار کسرمخلوط استوکیومتریک و میدان استهلاک اسکالر حل اولیه می‌شوند. آن‌ها در مطالعه‌شان برای NO_x به‌دست‌آمده تطابق خوبی با نتایج آزمایشگاهی به‌دست آوردند.

کوئلهو و پیترز[۸] روش اویلری را به‌طور گسترده‌ای برای یک شعله پیلوت متان-هوا به‌کار بردند و توافق خوبی را با نتایج آزمایشگاهی به‌دست آوردند. آن‌ها همچنین تاثیر تعداد ذرات و شرایط اولیه بر روی نرخ استهلاک اسکالر را بررسی کردند.

لیو و همکارانش در سال ۲۰۰۶ از مدل فلیملت برای مدل‌سازی شعله آرام اتیلن-هوا استفاده کردند. آن‌ها جداول مدل را از حل شعله جریان مخالف در مقادیر کرنش مختلف به‌دست آورده و با نتایج حل مستقیم معادلات بیضوی حاکم مقایسه کردند. نتایج آن‌ها با نتایج مدل فلیملت و حل مستقیم همخوانی داشت، ولی محل وقوع مقدار ماکزیمم گونه‌هایی مانند CO_2 و H_2O را متفاوت از نتایج عددی به‌دست آورد[۹]. در همین سال، کالارامونت و همکارانش کاربرد مفهوم فلیملت آرام را برای شبیه‌سازی چندبعدی شعله‌های آرام پیش‌مخلوط به‌کار بردند. آن‌ها با ارزیابی عملکرد فلیملت‌های گذرا و دایم معیارهای متفاوتی برای عمر فلیملت‌های لاگرانژی به‌دست آوردند. در این بررسی، گنجاندن پدیده‌ای مانند نفوذ دیفرانسیلی[۳] به‌همراه اعداد لوئیس ثابت برای هر گونه مطالعه شد[۱۰]. در سال ۲۰۱۱، دوازده‌امامی و عشقی‌نژاد از مدل فلیملت پایا برای محاسبه دما و کسر جرمی گونه‌ها در یک شعله فواره[۴] استفاده کردند. آن‌ها جهت اعمال این مدل از شبکه‌های عصبی مصنوعی استفاده کردند[۱].

عملکرد مکانیزم‌های GRI در شعله‌های آرام و مغشوش، با مدل‌های احتراقی مختلف به‌منظور پیش‌بینی NOx در برخی مطالعات بررسی شده است. وولی و همکارش، در سال ۲۰۰۴، سه شعله غیرپیش‌آمیخته پیلوت و غیرپیلوت متان را با استفاده از مدل CMC مرتبه اول شبیه‌سازی کردند. آن‌ها اثرات انواع مدل‌های اغتشاشی و سینتیک‌های شیمیایی متفاوت را بررسی کردند. آن‌ها پی بردند که کسر جرمی Nox با استفاده از مکانیزم GRI-Mech 3.0 خطای زیادی را با نتایج تجربی داشته، اما با استفاده از مکانیزم GRI-Mech 2.1 این خطا به مقدار قابل توجهی کاهش می‌یابد[۱۱]. همچنین، در سال ۲۰۰۵، ریچارد و پوپ شعله پیلوت D، E و F را به‌منظور تاثیر مکانیزم‌های متفاوت، با استفاده از مدل PDF، شبیه‌سازی کردند. آن‌ها در

1. Scalar dissipation rate
2. Parabolic
3. Differential diffusion
4. Jet

www.SID.ir

Archive of SID

بررسی‌شان به این نتیجه رسیدند که مکانیزم GRI3.0 سطح NO را تقریبا دو برابر مکانیزم GRI2.1 نسبت به نتایج تجربی پیش‌بینی می‌کند. پیش‌بینی توزیع دما و کسر جرمی گونه‌های اصلی توسط این دو مکانیزم تطابق خوبی با نتایج تجربی نیز داشت[۱۲].

در سال ۲۰۰۸، لیو و چوی، با استفاده از مدل فلیملت ناپایای اویلری، یک شعله فواره CH4/H2/N2 را شبیه‌سازی کردند. آن‌ها با استفاده از این مدل و مکانیزم‌های GRI3.0 و GRI 2.1 به پیش‌بینی تشکیل NO پرداختند و دریافتند که این دو مکانیزم در پیش‌بینی دما و کسرجرمی گونه‌ها، به‌جز NO، تطابق خوبی با نتایج آزمایشگاهی دارند. آن‌ها همچنین اثر تعداد فلیملت‌ها و انتقال حرارت تابشی را بر روی پیش‌بینی تشکیل NO بررسی کردند[۱۳]. آنها همین مدل را در سال ۲۰۰۹ برای تحلیل تشکیل NO در یک شعله فواره هم‌محور، در هوای رقیق از اکسیژن با دمای بالا، به‌کار بردند[۱۴]. در اکثر کارهای انجام‌شده فرضیات زیادی، مانند فرض حالت پایا، بر روی معادلات فلیملت درنظر گرفته شده است. فرض حالت پایا در مدل‌سازی واکنش‌های کندی مانند تشکیل آلاینده‌ها و پدیده‌های پیچیده‌ای مانند انتقال حرارت تابشی جواب‌های قابل‌قبولی را ارائه نمی‌دهد. همچنین، در بین مدل‌های ارائه‌شده، مدل فلیملت، به‌دلیل جداکردن واکنش‌های شیمیایی از میدان مغشوش، می‌تواند سینتیک شیمیایی را با هر سطحی از معادلات و پیچیدگی به‌طور جدا از کد حل معادلات بقاء درنظر بگیرد. به همین منظور، با استفاده از این مدل می‌توان اثر مکانیزم‌های شیمیایی را به‌سادگی بررسی کرد.

هدف از انجام این مقاله، مقایسه دو مدل احتراقی فلیملت پایا و فلیملت ناپایا در یک شعله غیرپیش‌مخلوط مغشوش با داده‌های آزمایشگاهی کامل است. مشاهده اهمیت اثرات ناپایایی در مدل‌سازی این شعله‌ها براساس مدل احتراقی فلیملت ناپایا و اثر به‌کارگیری مکانیزم‌های اشاره‌شده بر پیش‌بینی‌های احتراق از دیگر اهداف مقاله حاضر است. از این رو، در کار حاضر، میدان دما برای یک شعله پایدار CH4/H2 در یک محفظه احتراق با حضور یک جسم مانع با استفاده از مدل فلیملت پایا و پیش‌بینی تشکیل NO_x با استفاده از روش اویلری و دو مکانیزم GRI3.0 و GRI2 بررسی می‌شود.

درباره مبنای مدل فلیملت آرام و بسط آن به مدل ذره اویلری در بخش بعد بحث خواهد شد. سپس، به‌کارگیری عددی مدل اویلری پس‌پردازنده[1] توضیح داده می‌شود. همچنین، برای اعتبارسنجی نتایج این مدل از مکانیزم‌های شیمیایی متفاوتی استفاده می‌شود.

مدل فلیملت آرام

از آنجایی که اختلاط کنترل‌کننده فیزیکی پدیده‌ها در شعله‌های غیرپیش‌مخلوط است، مطالعه ساختار این شعله‌ها در فضای کسر مخلوط (اختلاط) انجام می‌شود. به‌طور کلی، برای تشریح ساختار شعله‌های غیرپیش‌مخلوط، می‌توان از کمیتی به‌نام کسرمخلوط[2] استفاده کرد. کسر مخلوط کمیتی بقایی بوده که نشان‌دهنده اختلاط بین اکسیدکننده و سوخت است. بیلگر برای بیان این کمیت رابطه زیر را بیان کرد[۱۵]:

$$Z=\frac{\frac{2\left(Z_C-Y_{C,2}\right)}{MW_C}+\frac{0.5\left(Z_H-Y_{H,2}\right)}{MW_H}+\frac{\left(Y_{O,2}-Z_O\right)}{MW_O}}{\frac{2\left(Y_{C,1}-Y_{C,2}\right)}{MW_C}+\frac{0.5\left(Y_{H,1}-Y_{H,2}\right)}{MW_H}+\frac{\left(Y_{O,2}-Y_{O,1}\right)}{MW_O}} \qquad (۱)$$

در رابطه بالا، Y_s کسرجرمی عناصر، MW_s وزن مولکولی اتمی آن‌ها و اندیس ۱ و۲ مربوط به جریان سوخت و اکسنده است. در شعله‌های نفوذی، احتراق معمولا در یک لایه نازک در مجاورت سطح مخلوط استوکیومتری اتفاق می‌افتد.

1. Postprocessing
2. Mixture fraction

www.SID.ir

Archive of SID

در جایی که اختلاط کنترل‌کننده پدیده‌های یک شعله باشد و کوچک‌ترین گردابه‌ها[1] نتوانند در لایه نازک واکنشی نفوذ کنند، ساختار شعله می‌تواند آرام فرض شود. ایده اصلی روش فلیملت از شعله‌های آرام به‌دست می‌آید و در شعله‌های مغشوش نیز قابل‌استفاده است[۱۶]. فلیملت به لایه‌های واکنشی-نفوذی[2] نازک می‌گویند که در جریان غیر واکنشی احاطه شده‌اند. در مدل فلیملت آرام، شعله نفوذی مغشوش به‌صورت یک مجموع آماری از فلیملت‌ها درنظر گرفته می‌شود[۴].

معادلات فلیملت یک شکل ساده‌شده‌ای از معادلات بقای گونه‌ها و انرژی‌اند. فرضیه اصلی این مدل، بر مبنای نازک بودن لایه واکنشی است. در این مدل از اثرات چندبعدی مانند مشتقات اسکالرهای واکنشی در جهت مماسی شعله در مقایسه با جهت عمودی صرف‌نظر می‌شود. از این رو، معادلات فلیملت را می‌توان از معادلات بقای انرژی و گونه‌ها با انتقال دستگاه مختصات از فضای فیزیکی به فضای کسر مخلوط به‌صورت زیر به‌دست آورد[۳]:

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} - \frac{\rho\chi}{2}\frac{d^2 Y_i}{dZ^2} - \dot{\omega}_i = 0 \qquad (۲)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\rho\chi}{2}\frac{d^2 T}{dZ^2} - \frac{1}{c_p}\sum_{i=1}^{N} h_i \dot{\omega}_i + \frac{Q_R}{c_p} = 0 \qquad (۳)$$

برای به‌دست آوردن معادلات فلیملت بالا، عدد لوئیس[3] برابر یک درنظر گرفته شده است. در رابطه بالا، Y_i کسر جرمی گونه، T دما، ω_i نرخ تولیدشیمیایی گونه i، Q_R میزان انتقال حرارت تشعشعی و h_i آنتالپی گونه‌ی i است. همچنین، χ نرخ استهلاک اسکالر بوده و بیانگر میزان گرادیان کسر مخلوط در جهت y (عمود بر سطح شعله) است.

$$\chi = 2D\left(\frac{dZ}{dy}\right)^2 \qquad (۴)$$

که D ضریب پخش است. واحد χ ، 1/s بوده و در واقع، χ معکوس مقیاس زمانی پخش (شبیه کرنش) است. این پارامتر شارهای نفوذی ناشی از گرادیان‌های فضایی را به‌عنوان یک تابع گرادیان کسر مخلوط توصیف می‌کند و به همین دلیل، تاثیر میدان جریان به‌طور کامل به‌وسیله این کمیت نشان داده می‌شود.

نرخ استهلاک اسکالر می‌تواند به‌عنوان یک تابع از کسرمخلوط درنظر گرفته شود[۴]:

$$\chi\ Z\ = \frac{a_s}{\pi}\exp(-2\left[erfc^{-1}\ \ 2Z\ \right]^2) \qquad (۵)$$

در رابطه بالا، $erfc^{-1}$ معکوس تابع خطای متمم و a_s گرادیان سرعت در نقطه‌ی سکون است. رابطه (۵) می‌تواند برحسب مقادیر استوکیومتریک به‌صورت زیر بیان شود[۵]:

$$\chi = \chi_{st}\frac{f(Z)}{f(Z_{st})} \qquad (۶)$$

در این رابطه، $f(Z)$ تابع نمایی معادله (۵) است.

پیچ و همکارانش[۶] ترم انتقال حرارت تابشی را در معادلات فلیملت با تقریب گازهای نازک نوری به‌کار گرفتند:

$$\dot{q}_R''' = 4\sigma(T^4 - T_a^4)\sum p_i \alpha_{p,i} \qquad (۷)$$

1. Eddy
2. Reactive-Diffusive Layer
3. Lewis Number

www.SID.ir

Archive of SID

$\dot{q}_R'''$ نرخ اتلاف حرارت بر واحد حجم است. σ ثابت استفان-بولتزمن بوده، T_a دمای محیط، p_i و $\alpha_{p,i}$ فشار جزئی و ضریب جذب گونه‌های i هستند. در اینجا از ضریب جذب همه گونه‌ها در مقابل گونه‌های CO_2 و H_2O صرف‌نظر می‌شود. پیچ و همکارانش در این تحقیق نشان دادند که درنظرگرفتن جمله تابش در معادلات فلیملت پایا اتلاف حرارتی را بیش از حد پیش‌بینی کرده و میدان دما را غیرواقعی به‌دست می‌آورد. بنابراین، در محاسبات فلیملت پایا از درنظرگرفتن این جمله صرف‌نظر شده و ارزیابی اثر این جمله در محاسبات فلیملت ناپایا منظور می‌شود.

به منظور پیاده‌سازی مفهوم فلیملت پایا برای مدلسازی یک شعله آشفته، ابتدا یک کتابخانه فلیملت (شامل توزیع دما و کسر جرمی گونه‌ها) ساخته می‌شود. از این رو، ابتدا معادلات (۲) و (۳) در فضای کسرمخلوط با شرایط مرزی زیر تعریف می‌شوند. سپس، این معادلات با داشتن یک مکانیزم شیمیایی و نرخ استهلاک مشخص (به‌عنوان ورودی از نرخ استهلاک در حالت تعادلی تا نرخ استهلاک خاموشی این شعله) انتگرالگیری شده و مقادیر کسر جرمی و دما در حالت پایا به‌صورت تابعی از کسر مخلوط و نرخ استهلاک اسکالر به‌دست می‌آید. شرایط مرزی این معادلات به‌صورت زیر است:

$$Z = 0 : \quad Y_i = Y_p = Y_f = 0 \qquad ,Y_{oxi} = 1 \tag{۸}$$

$$Z = 1 : \quad Y_i = Y_p = Y_{oxi} = 0 \qquad ,Y_f = 1 \tag{۹}$$

از آنجایی که χ تابعی از χ_{st} و Z است، بنابراین، حل پایای معادلات فلیملت تابعی از این دو پارامتر خواهد بود. با استفاده از شرایط مرزی بالا، کسر جرمی گونه‌ها و دما به‌صورت تابعی از کسر مخلوط به‌دست می‌آیند و نرخ استهلاک اسکالر استوکیومتریک به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$Y_i = Y_i(Z, \chi_{st}) \tag{۱۰}$$

$$T = T(Z, \chi_{st}) \tag{۱۱}$$

تاثیر نوسانات اغتشاشی بر روی این کمیت‌ها، با استفاده از توابع دانسیته احتمال فرضی، انجام می‌شود. میانگین فاوره[1] این کمیت‌ها را برحسب نرخ استهلاک استوکیومتریک می‌توان از رابطه زیر به‌دست آورد[۵]:

$$\varphi_i\ \tilde{Z}, Z''^2, \chi_{st}\ = \int_0^1 \varphi_i\ Z, \chi_{st}\ P\ Z\ dZ \tag{۱۲}$$

از رابطه (۶) می‌توان میانگین فاوره کمیت‌ها را برحسب نرخ استهلاک اسکالر به‌صورت زیر به‌دست آورد:

$$\varphi_i = \varphi_i\ \tilde{Z}, Z''^2, \tilde{\chi} \tag{۱۳}$$

در این روابط، $\tilde{Z}$ کسر مخلوط متوسط و Z''^2 واریانس کسر مخلوط است. $P\ Z$ تابع دانسیته احتمال است که معمولا تابع β فرض شده و به دو پارامتر کسر مخلوط متوسط و واریانس آن وابسته است.

روش عددی فلیملت پایا

روش استفاده‌شده در این مقاله توسط پیچ و پیترز[۱۷] توصیف شده است. بعد از به‌دست آوردن توزیع گونه‌ها و دما با استفاده از معادلات (۲) و (۳)، بانک اطلاعاتی به‌نام کتابخانه فلیملت ساخته می‌شود.

1. Favre

www.SID.ir

Archive of SID

ورودی‌های این کتابخانه شامل سه پارامتر کسر مخلوط متوسط، نرخ استهلاک اسکالر و واریانس کسر مخلوط‌اند. معادلات بقا، که شامل معادله پیوستگی، تکانه، انتقال کسر مخلوط متوسط و واریانس این کمیت است، در محدوده محفظه احتراق به کمک روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی حل می‌شود. محاسبات آشفتگی نیز به‌همراه این معادلات با مدل اغتشاشی k-ε استاندارد در نرم‌افزار فلوئنت انجام می‌شود. سپس، با مقادیر به‌دست آمده برای کسر مخلوط متوسط، واریانس این کمیت و نرخ استهلاک اسکالر محاسبه شده در هر سلول با استفاده از معادله (۱۴)، توزیع گونه‌ها و دما از بانک اطلاعاتی خوانده می‌شود.

$$\tilde{\chi} = c_{\chi} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} z''^2 \qquad (۱۴)$$

در این رابطه $c_{\chi} = 2$ فرض می‌شود[۱]. سپس، به‌وسیله انتگرال معادله (۱۲)، مقادیر متوسط کسر جرمی گونه‌های شیمیایی و دما محاسبه می‌شود. برای تولید فلیملت‌ها (بانک اطلاعاتی) از کد FlameMaster [۱۸] با تغییردادن χ از مقادیر نزدیک به تعادلی($\chi \simeq 0$) تا خاموشی کامل فلیملت (در اینجا برای شعله مورد نظر در $\chi \simeq 55$ اتفاق می‌افتد) استفاده می‌شود. شرایط مرزی برای جریان سوخت-هوا و مکانیزم سینتیک شیمیایی همراه با داده‌های ترمودینامیکی دو ورودی مورد نیاز این کد هستد. به‌منظور حل بی‌دررو، از جمله Q_R در معادله (۳) نیز صرف‌نظر می‌شود. مکانیزم GRI 3.0، که درمقاله حاضر استفاده شده، شامل ۳۲۵ واکنش به‌همراه ۵۳ گونه است. دراین کد تعداد ۵۰ فلیملت (۵۰ نرخ استهلاک اسکالر متفاوت) تولید می‌شود.

با حل‌کردن معادلات (۲) و (۳)، نیاز به حل معادلات انتقال کسر جرمی تک‌تک گونه‌ها در کد حل جریان نیست. همچنین می‌توان سینتیک شیمیایی را با هر سطحی از معادلات و پیچیدگی به‌طور جدا از کد حل معادلات بقاء درنظر گرفت.

مدل فلیملت ذره اویلری

در روش اویلری، ذرات مختلف، نشان دهنده فلیملت‌هایی هستند که به میدان جریان مغشوش وارد شده‌اند و در طول کل منطقه جریان انتقال می‌یابند. احتمال پیداکردن یک ذره سیال در موقعیت داده‌شده، به‌وسیله حل‌کردن یک معادله انتقال پخش جابه‌جایی، محاسبه می‌شود. مسیری که یک ذره در کل جریان مغشوش طی می‌کند، نشان دهنده سابقه فلیملت‌های متفاوت است. معادله انتقال اویلری برای احتمال پیداکردن یک ذره نشان‌دهنده فلیملت می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود[۷]:

$$\frac{\partial \rho \tilde{I}_l}{\partial t} + \nabla.(\rho V \tilde{I}_l) - \nabla.(\frac{\mu_t}{\mathrm{Sc}_t} \nabla \tilde{I}_l) = 0 \qquad (۱۵)$$

در این معادله، $I_l(X,t)$ احتمال پیداکردن یک فلیملت l (اندیس l تعداد ذرات درنظر گرفته شده برای حل معادله است) در موقعیت X و زمان t است. Sc_t عدد اشمیت مغشوش است که طبق عدد اشمیت مغشوش درنظر گرفته‌شده برای معادلات کسرمخلوط میانگین و واریانس این کمیت برابر با ۰/۷ درنظر گرفته می‌شود.

با استفاده از حل پایای جریان و میدان دما، فلیملت‌ها در شروع محاسبات فلیملت ناپایا در زمان $t = 0$ مقداردهی اولیه می‌شوند. توزیع اولیه ذرات با استفاده از سلول‌های محاسباتی، که دو شرط کسرمخلوط متوسط بیشتر از استوکیومتری و همزمان یک دمای میانگین کمتر از ۱۸۰۰K را دارا باشند، به‌دست می‌آیند. با دو شرط ذکرشده، در داخل این ناحیه، می‌توان از تشکیل اولیه NO_x در شرایط اولیه صرف‌نظر کرد و رابطه زیر را نوشت:

$$I_l\ X\ = \begin{cases} 1 : \tilde{Z} > Z_{init}, \tilde{T} < 1800K \\ 0 : \tilde{Z} < Z_{init} \end{cases} \qquad (۱۶)$$

www.SID.ir

Archive of SID

در اینجا، $\tilde{Z}$ کسرمخلوط میانگین متوسط و Z_{init} یک ثابت است که باید بزرگ‌تر از Z_{st} تعیین شود. شرایط مرزی به‌کار گرفته شده در این معادله برای I، در ورودی سوخت و همچنین در ورودی هوا، برابر با صفر است. در خروجی و دیواره‌ها $\nabla I = 0$ فرض می‌شود.

از آنجایی که ذرات براساس موقعیت‌شان در طول کل دامنه حل در داخل جریان، با مقادیر متفاوتی از نرخ استهلاک اسکالر روبه‌رو می‌شوند، برای این ذرات درنظرگرفتن یک مقدار میانگین برای نرخ استهلاک اسکالر مشروط در مخلوط استوکیومتریک ضروری به‌نظر می‌رسد[۶]. همین‌طور که ذرات فلیملت در کل دامنه حرکت می‌کنند، هر ذره یک تاریخچه فلیملت متفاوت دارد. هر تاریخچه فلیملت نشان دهنده تغییرات نرخ استهلاک اسکالر است. در یک زمان داده‌شده (t)، نرخ استهلاک اسکالر میانگین صفحه‌ای فلیملت l در شرایط استوکیومتریک، به‌وسیله تبدیل انتگرال صفحه‌ای به انتگرال‌های حجمی و وزن‌گذاری با احتمال وقوع ذره l به‌صورت زیر به‌دست می‌آید[۷]:

$$\hat{\chi}_{st}\ t\ = \frac{\int_V \tilde{I}_l\ X,t\ \bar{\rho}\ X\ \chi_{st}\ X\ ^{3/2} \times \tilde{P}\ Z_{st};X\ dV}{\int_V \tilde{I}_l\ X,t\ \bar{\rho}\ X\ \chi_{st}\ X\ ^{1/2} \times \tilde{P}\ Z_{st};X\ dV} \qquad (۱۷)$$

در این رابطه، V حجم کل دامنه حل است. نرخ استهلاک مشروط (χ_{st}) از رابطه (۶) به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$\chi_{st} = \frac{c_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} z^{"2}}{\int_0^1 f(Z)\ /\ f(Z_{st})\tilde{P}\ Z\ dZ} \qquad (۱۸)$$

ذرات فلیملت آزادشده به‌وسیله جابه‌جایی و نفوذ در محفظه احتراق پراکنده می‌شوند. کسر جرمی میانگین فاوره گونه‌ها از رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$\tilde{Y}_k\ X\ = \left(\frac{\sum_{l=1}^{N_l} \int_0^{t_{final}} \tilde{I}_l\ X,t\ \int_0^1 Y_K\ Z,\hat{\chi}_{st,n}\ \times \tilde{P}\ Z\ dZ\ dt}{\sum_{l=1}^{N_l} \int_0^{t_{final}} \tilde{I}_l\ X,t\ dt} \right) \qquad (۱۹)$$

روش عددی فلیملت ناپایا

روش حل برای این مدل شامل دو مرحله است: مرحله اول محاسبات بوسیله فلوئنت انجام می‌شود، در حالی که محاسبات مرحله دوم به‌طور جداگانه در نرم‌افزار متلب انجام می‌شود. محاسبات پس‌پردازنده با یک حل فلیملت پایای همگراشده، شروع می‌شود. سپس، در این مرحله، تنها معادله انتقال ناپایا (معادله (۱۵)) برای یک ذره فلیملت با استفاده از داده‌های جریان در کد فلوئنت حل می‌شود و I_l در هر تکرار زمانی محاسبه می‌شود. با استفاده از کسرمخلوط میانگین $\tilde{Z}$ و واریانس کسرمخلوط میانگین $Z^{"2}$ و نرخ استهلاک اسکالر میانگین $\tilde{\chi}$، برای هر سلول نرخ استهلاک اسکالر مشروط χ_{st} از معادله (۱۸) محاسبه می‌شود. سپس، نرخ استهلاک متوسط دامنه حل (معادله (۱۷)) در هر تکرار زمانی محاسبه می‌شود. با استفاده از مقادیر $\hat{\chi}_{st}(t)$ معادلات فلیملت ناپایا با فرض لوئیس واحد در کد FlameMaster حل می‌شوند. در اینجا از دو مکانیزم GRI3.0 و GRI2.11 برای تولید کتابخانه‌های فلیملت ناپایا استفاده می‌شود. شرط اولیه برای این فلیملت ناپایا از یک بانک اطلاعاتی حل حالت پایا گرفته می‌شود. شرط اولیه کسرجرمی اولیه گونه‌های دارای نیتروژن (به‌جز N_2) صفر درنظر گرفته می‌شود. همچنین، شرط اولیه این معادلات از حل فلیملت پایا گرفته می‌شود. در نهایت، مقادیر میانگین فاوره گونه‌ها مانند NO_x از رابطه (۱۹) به‌دست می‌آید. در این کار جریان آشفته بوسیله مدل k-ε استاندارد مدل‌سازی می‌شود.

www.SID.ir

Archive of SID

شعله متان/هیدروژن با محفظه احتراق در حضور یک مانع

شعله نفوذی مورد مطالعه در این پژوهش، در یک محفظه احتراق با حضور یک بلاف بادی[1] است که با نام HM1 در دانشگاه سیدنی معرفی شده است. نتایج تجربی این مشعل به‌وسیله دالی و همکارانش در آزمایشگاه ساندیا[2] ارائه شده است. مشعل این شعله از یک جسم (مانع) بلاف بادی با قطر D =۵۰ mm تشکیل شده وجریان هوا با سرعت ۴۰m/s به‌صورت جریان هم‌جهت[3] از اطراف آن وارد محفظه احتراق می‌شود. قطر نازل ورودی سوخت $d = ۳/۶$ mm، سرعت فواره سوخت ۱۱۸m/s و عدد رینولدز آن $\mathrm{Re} = ۱۵۸۰۰$ است[۱۹].

سوخت شعله مورد بررسی دارای ۵۰ درصد متان و ۵۰ درصد هیدروژن (حجمی) و اکسیدکننده هواست. کسر مخلوط استوکیومتریک در این شعله ۰/۰۵ است. دمای هوا و سوخت ورودی ۳۰۰ K است. محفظه احتراق (استوانه‌ای شکل) در جهت محوری 200mm و در جهت شعاعی 150mm است. شرایط مرزی دیواره‌ها بی‌دررو فرض می‌شود. یک شبکه متقارن محوری در شکل زیر نشان داده شده است. بعد از آزمایش مستقل‌بودن حل از شبکه بندی، از یک شبکه ۱۷۰×۳۰۰ با سلول‌های مربعی استفاده می‌شود.

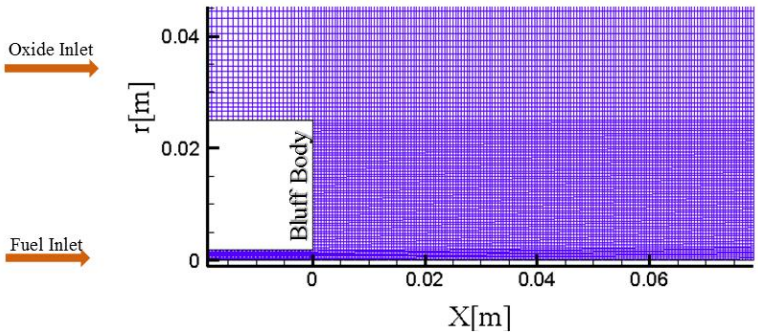

Figure 1- Geometry and Axisymmetric grid HM1 Flame

شکل ۱- هندسه و شبکه‌بندی برای محفظه HM1

نتایج

برای پیش‌بینی میدان احتراقی، ابتدا خطوط جریان میدان اختلاط بررسی می‌شوند. نتایج مدل‌سازی با فلیملت پایا در مقاله حاضر با نام SLFM[4] در نمودارها مشخص می‌شود. نتایج به‌ترتیب در سه فاصله متفاوت X/D (D =۵۰mm) مقایسه می‌شوند. خطوط جریان نزدیک مانع بلاف بادی و کانتور کسر مخلوط و دما در شکل ۲ نشان داده شده است. دو ناحیه متفاوت، که شامل دو ورتکس خارجی (نزدیک جریان هوا) و داخلی (نزدیک جریان سوخت) در ناحیه گردابی‌اند، در این شکل مشاهده می‌شوند. وجود این ناحیه به پایدارشدن[5] شعله کمک می‌کند. در این شعله، ناحیه گردابه‌ای پیش‌بینی‌شده تا $X/D \approx 1.8$ گسترده می‌شود و کانتور استوکیومتریک ($Z_{st} = 0.05$) در لبه بیرونی ورتکس خارجی آن قرار می‌گیرد. کسرمخلوط پایین استوکیومتریک مخلوط سوخت، یک ناحیه واکنش نازک در خارج از لایه‌ی برشی بیرونی ایجاد می‌کند. ورتکس داخلی به‌وسیله کسرمخلوط‌های بزرگ‌تر از ترکیب استوکیومتری مشخص می‌شود و در نتیجه منجر به دماها و نرخ‌های واکنش پایین‌تر می‌شود. همچنین، گرادیان چگالی بالا در لایه برشی بیرونی باعث ریزش ورتکس می‌شود.

1. Bluff Body
2. Sandia National Laboratory
3. Coflow
4. Steady Laminar Flamelet Modeling
5. Stabilize

www.SID.ir

Archive of SID

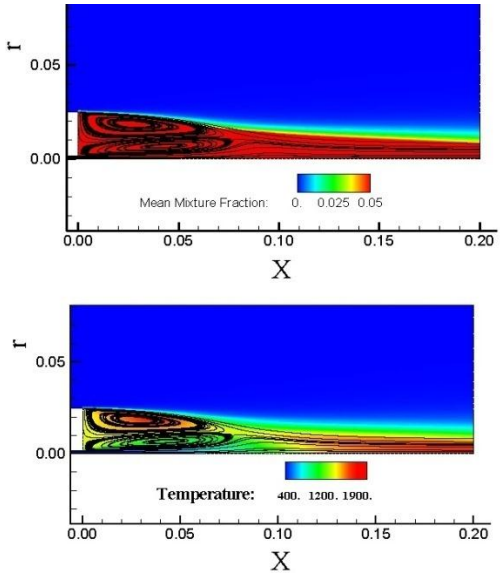

Figure 2- The streamlines for mixture fraction and temperature contours

شکل ۲- خطوط جریان تشکیل‌شده به همراه کانتورهای کسرمخلوط و دما (ابعاد شکل برحسب مترند)

در شکل ۳ نتایج میدان کسرمخلوط نشان داده شده است. کسرمخلوط میانگین درسه مقطع هم‌خوانی خوبی با نتایج تجربی (ارائه‌شده توسط دالی و همکارانش[۱۹]) دارد. همچنین، اگر تاثیر مانع بلاف بادی کمترشود (در هر موقعیت محوری داده شده از مانع دورتر شویم) و ناحیه گردابی باریک‌تر شود، توزیع شعاعی کسرمخلوط میانگین به‌سمت محور دامنه حل منتقل می‌شوند. در برخی از این نواحی، مقدار کسرمخلوط بیشتری در مقایسه با نتایج تجربی پیش‌بینی می‌شود.

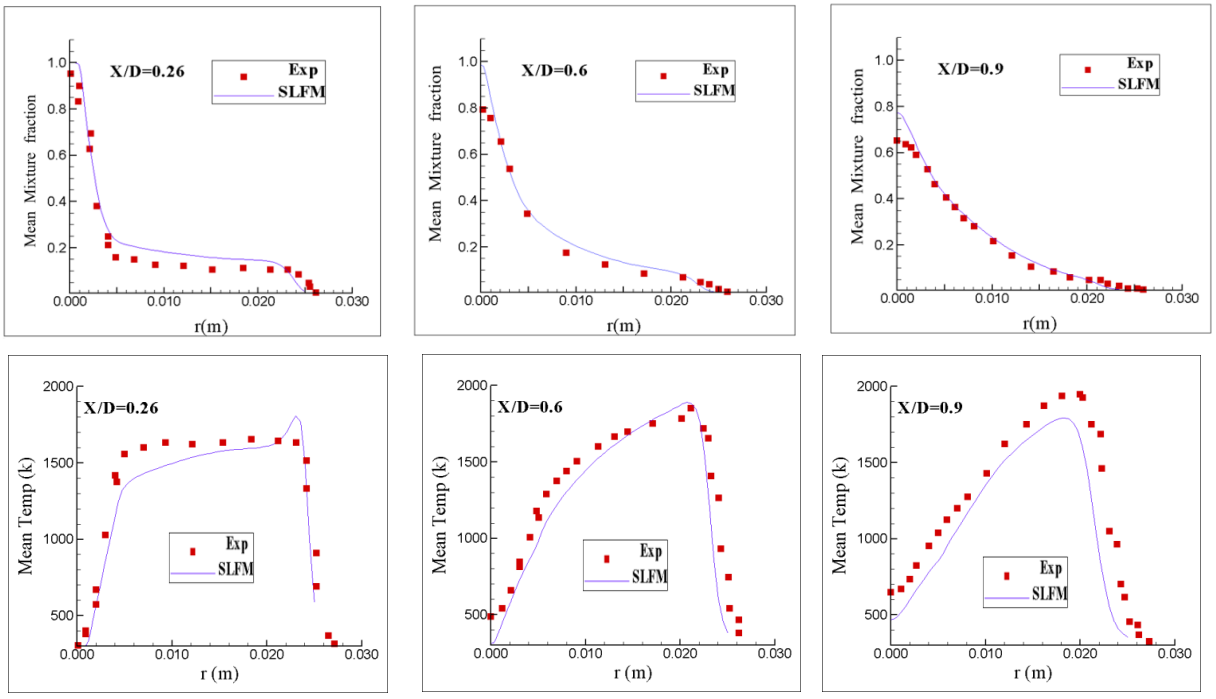

Figure 3- Comparison of radial profiles of temperature and mixture fraction with experimental data at different axial positions

شکل ۳- مقایسه کمیت‌های مختلف با داده‌های تجربی در مقاطع مختلف، به‌ترتیب از بالا (کسر مخلوط میانگین) و (دمای میانگین)

www.SID.ir

Archive of SID

همچنین، دمای میانگین شعاعی در شکل ۳ در موقعیت‌های مختلف مشاهده می‌شود. در $X/D=0.26$، یک قله دمایی در $r\simeq 0.025m$ نزدیک لایه برشی بین دو ورتکس ایجاد شده است. در این نقطه ممکن است شعله به‌علت شروع ناحیه‌ی گردابی به‌طور پایداری نسوزد. بدین علت که در نزدیکی‌های نازل، به‌علت وجود اغتشاشات بیشتر، امکان نفوذ گردابه‌ها به داخل ناحیه واکنش وجود دارد که این با فرض فلیملت در تناقض است. به‌طور کلی تفاوت‌های قابل توجه در دمای میانگین ممکن است به‌علت انحراف از رژیم فلیملت باشد.

با استفاده از پیش‌بینی‌های میدان اختلاط، برای هر سلول یک نرخ استهلاک اسکالر میانگین χ_{st} با استفاده از نرم‌افزار متلب محاسبه می‌شود. شکل ۴ توزیع این کمیت را در سه مقطع نشان می‌دهد. در این نمودارها در هر مقطع، دو قله یکی نزدیک به ورودی سوخت و دیگری در بین مانع بلاف و جریان ورودی هوا می‌تواند دیده شود. این قله‌ها نشان‌دهنده لایه‌های برشی ایجادشده‌اند که با افزایش فاصله محوری کاهش می‌یابند. مکان این قله‌ها در همان نقاط با بیشترین دما رخ می‌دهند.

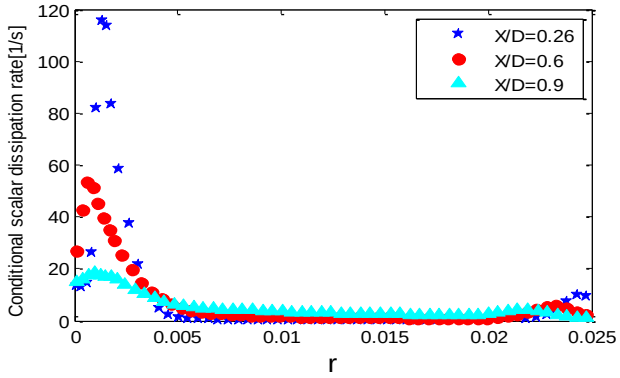

Figure 4- Conditional scalar dissipation rate values at different axial positions

شکل ۴- مقادیر نرخ استهلاک اسکالر استوکیومتریک در مقاطع مختلف

در این کار، همچون کار پیچ و همکارانش[۷]، شبیه‌سازی تنها با درنظرگرفتن یک ذره فلیملت انجام شده است[۷]. بعد از به‌دست آوردن حل پایای فلیملت، یک معادله انتقال اسکالر (معادله (۱۵)) بر روی نتایج به‌دست آمده حل می‌شود. با داشتن I_1 در هر تکرار زمانی، میانگین نرخ استهلاک اسکالر مشروط[1] (شرایط استوکیومتریک) برای کل دامنه حل در هر تکرار زمانی در شکل ۵ به‌دست می‌آید. همان‌طور که مشاهده می‌شود، تقریبا بعد از ۰/۰۱ ثانیه حل موردنظر به حالت پایا ($\approx 3.5(1/s)$) می‌رسد.

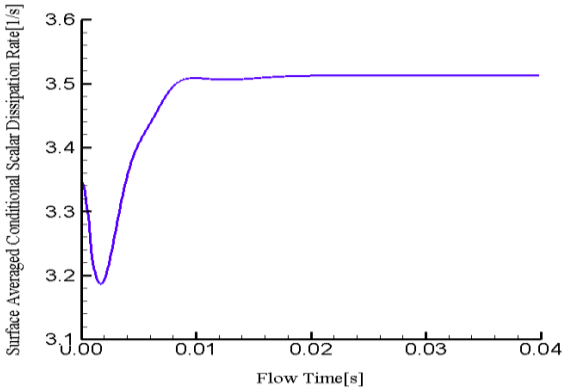

Figure 5- Transient evolution of a surface-averaged conditional scalar dissipation rate in the case of a single particle.

شکل ۵- ارزیابی زمانی نرخ استهلاک میانگین مشروط برای یک ذره

1. Conditional scalar dissipation rate

www.SID.ir

Archive of SID

از آنجایی که پیش‌بینی‌های مدل فلیملت پایا و ناپایا برای میدان دما و کسر جرمی گونه‌های اصلی مشابه‌اند، حل حالت ناپایا و مقایسه آن با حالت پایا تنها برای گونه NO (که سرعت تشکیل پایینی دارد) انجام می‌شود. نتایج مدل‌سازی با مدل فلیملت پایا با نام SLFM و با مدل فلیملت ناپایا (ذره اویلری) با نام EPFM[1] در نمودارها مشخص شده‌اند. این نتایج، در همان چهار مقطع بررسی شده حالت پایا، نشان داده شده‌اند.

در شکل ۶ مقایسه کسر جرمی گونه NO در دو حالت پایا و ناپایا با استفاده از مکانیزم GRI2.11 مشاهده می‌شود. به‌علت سرعت بسیار پایین تشکیل این گونه، اختلاف قابل‌توجهی در پیش‌بینی‌های دو حالت دیده می‌شود. از این رو، در این شعله به‌کارگیری فلیملت ناپایا برای گونه NO ضروری است.

مقادیر کسر جرمی NO با استفاده از دومکانیزم GRI3.0 و GRI2.11 با نتایج تجربی در شکل ۷ مقایسه شده‌اند. دلیل این مقایسه تفاوت نرخ‌های ثابت استفاده‌شده برای تشکیل واکنش NO در این مکانیزم‌هاست که در ادامه به آن اشاره خواهد شد. در برخی مطالعات مقایسه این دو مکانیزم نیز انجام شده است[۱۲،۱۱]. همچنین، در این نمودارها تاثیر جمله تابش در معادلات فلیملت ناپایا نیز بررسی شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج حاصل از دو مکانیزم بسیار با هم متفاوت بوده و به‌طور قابل‌توجهی به انتخاب نوع مدل فلیملت وابسته است. در موقعیت $X/D=0.26$، برای کسر جرمی NO یک قله در نزدیکی ضلع بیرونی ورتکس بیرونی مشاهده می‌شود (شکل ۷)

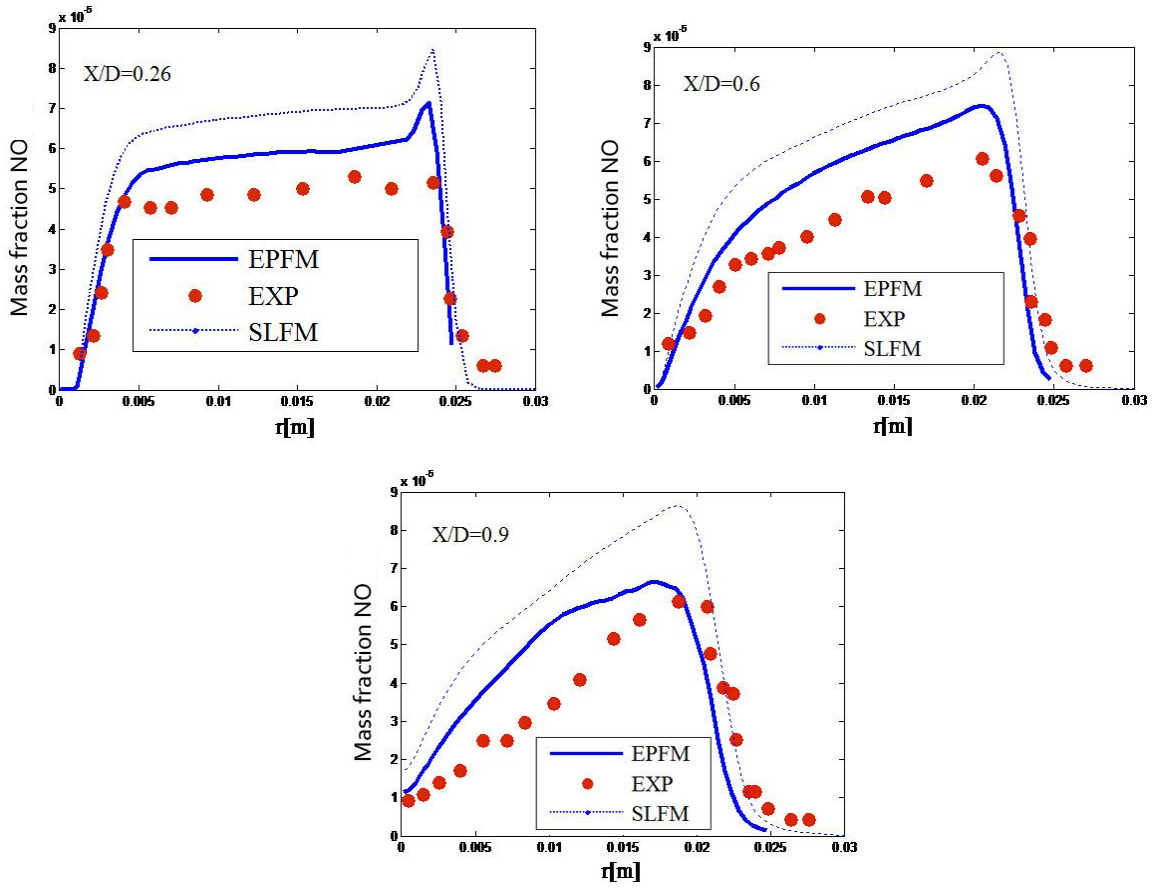

Figure 6- Comparison of steady and unsteady NO mass fraction profiles with experimental data at different axial positions

شکل ۶- مقایسه کسر جرمی گونه‌ی NO_X در حالت ناپایا و حالت پایا در مقاطع مختلف

1. Eulerian particle flamelet modelling

www.SID.ir

Archive of SID

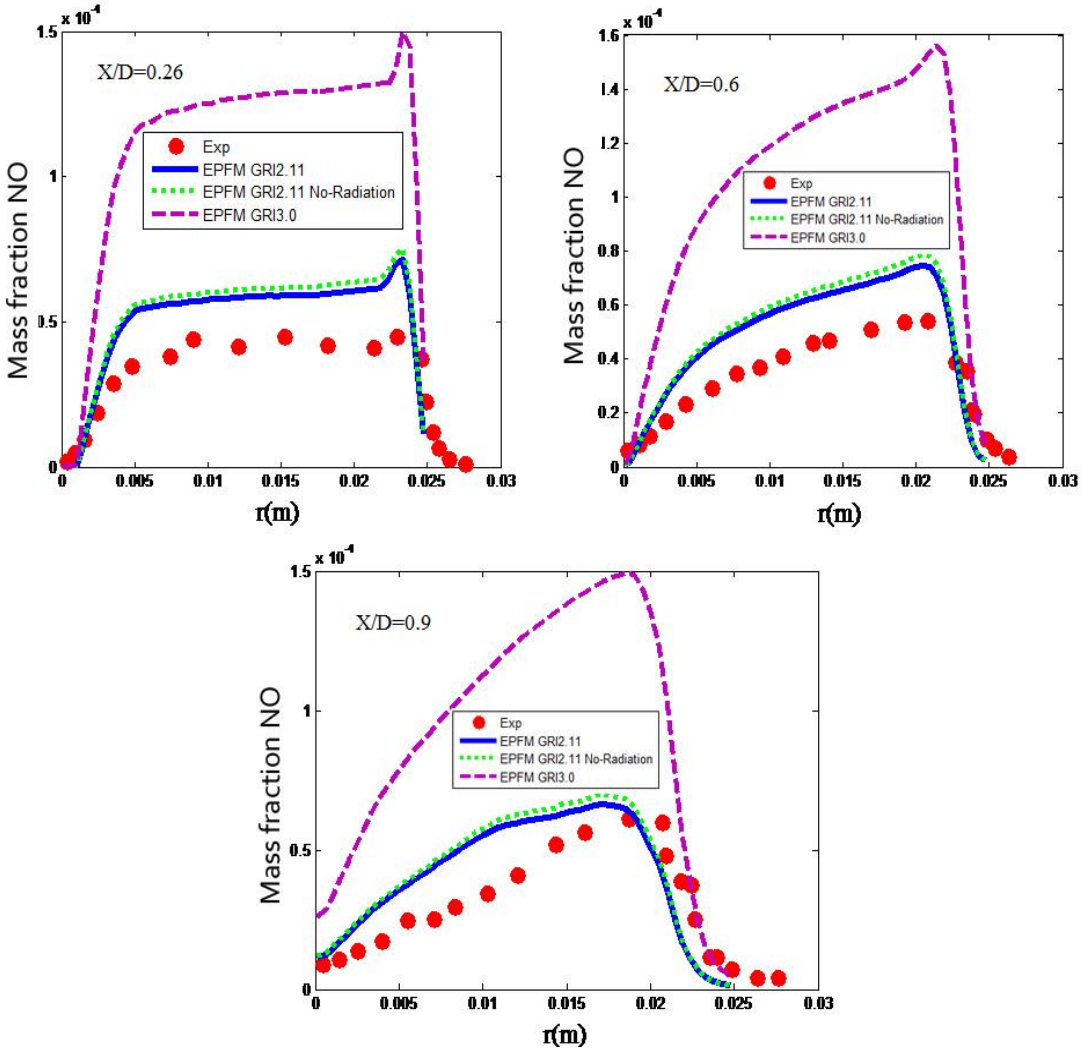

Figure 7: Comparison of unsteady NO mass fraction profiles with experimental data at different axial positions for two chemical mechanisms

شکل ۷- مقایسه کسر جرمی گونه NO_X در حالت ناپایا به وسیله دو مکانیزم با داده‌های تجربی

این قله به‌علت همان قله دمایی ایجادشده در توزیع دمای این مقطع است. مکانیزم GRI2.11 به‌همراه مدل فلیملت ناپایا نزدیک‌ترین پیش‌بینی را نسبت به حالت تجربی دارد. مدل فلیملت ناپایا به‌همراه مکانیزم GRI3.0 در همه موقعیت‌ها سطح NO بالاتری را پیش‌بینی می‌کند. مکانیزم GRI3.0 کسر جرمی گونه NO را تقریباً دوبرابر مکانیزم GRI2.11 پیش‌بینی می‌کند.

مقایسه بین این دو مکانیزم برای کسر جرمی NO در روش CMC[۲۰] نیز رفتار مشابهی را با این نتایج نشان می‌دهد. گیبرد[۲۱] در مقایسه بین این دو مکانیزم در تحقیقش اشاره کرد که نرخ ثابت استفاده شده برای واکنش $CH_2+H2=CH+H2$ در تشکیل CH، $2.06*10^{11}\ m^3/kmol$ برای GRI2.11 و $1.71*10^{11} m^3/kmol/s$ برای GRI3.0 است. بنابراین، CH تشکیل‌شده که در واکنش $CH+N_2=HCN+N$ مصرف می‌شود، برروی N2 تولیدشده، اثر می‌گذارد. همچنین، در این شعله مشاهده می‌شود که تابش اثر کمی بر روی کسر جرمی NO پیش‌بینی‌شده دارد.

www.SID.ir

Archive of SID

نتیجه‌گیری و جمع‌بندی

در این مقاله، شبیه‌سازی یک شعله متان/هیدروژن در یک محفظه احتراق در حضور یک جسم مانع با استفاده از مدل فلیملت پایا و ناپایا انجام شد. شبیه‌سازی‌های انجام‌شده با نتایج تجربی برای دما، کسرمخلوط و کسرجرمی گونه‌ها مقایسه شدند. نتایج مشاهده شده برای کسرمخلوط، همخوانی بسیار خوبی با داده های تجربی نشان می‌دهند. اختلافات اندک برای دماهای به‌دست آمده با نتایج تجربی در نزدیکی نازل سوخت می‌تواند به‌علت انحراف از رژیم فلیملت در این ناحیه باشد. بدین علت که در نزدیکی‌های نازل، به‌علت وجود اغتشاشات بیشتر، امکان نفوذ گردابه‌ها به داخل ناحیه واکنش وجود دارد که این با فرض فلیملت در تناقض است.

فرض حالت ناپایا در مدل‌سازی واکنش‌های کندی مانند تشکیل آلاینده‌ها جواب‌های بهتری نسبت به فرض حالت پایا ارائه داد. پیش‌بینی‌های NO به‌همراه مدل فلیملت ناپایا با استفاده از مکانیزم GRI2.11 توافق خوبی را با نتایج تجربی نشان می‌دهد. در شعله بلاف‌بادی تحقیق‌شده در این مقاله، انتقال حرارت تابشی در تشکیل NO تاثیرگذار نیست.

در تحقیقات آینده، تاثیر عدد لوئیس غیرواحد در معادلات فلیملت می‌تواند با استفاده از کد مورد نظر بررسی شود. همچنین، از هر نوع مکانیزم شیمیایی با هر سطح پیچیدگی می‌توان استفاده کرد. درکنار این کد نیز می‌توان از روش‌های دیگر مدلسازی اغتشاش استفاده کرد. به‌طور کلی این روش، به‌علت جداکردن حل معادلات بقا از حل مدل احتراقی، باعث کاهش زمان محاسبات شده و در نتیجه باعث تسریع در همگرایی نتایج می‌شود.

منابع

1. M. D. Emami and A. Eshghinejad Fa'rd, "Laminar Flamelet Modeling of a Turbulent CH4/H2/N2 Jet Diffusion Flame using Artificial Neural Networks," *Applied Mathematical Modelling*, 5, 2011, pp. 2082-2093.
2. S. B. Pope, "PDF methods for turbulent reactive flows," *Progress in Energy and Combustion Science*, 11, 1985, pp. 119-192.
3. S. H. Kim, K. Y. Huh and T. Liu, " Implementation of the Conditional Moment Closure Model to a Turbulent H2/CO - Air Stabilized on a Bluff- Body Flame," *Transactions of the Canadian Society of Mechanical Engineers*," 23, 1999, pp. 425-434.
4. N. Peters, "Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-premixed Turbulent Combustion," *Energy Combust Sci*, 3, 1984, pp. 319-339.
5. F. Mauss, D. Keller and N. Peters, "A Lagrangian Simulation of Flamelet Extinction and Re-ignition in Turbulent Jet Diffusion Flames," *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990, pp. 693-698.
6. H. Pitsch, M. Chen and N. Peters, "Unsteady flamelet modelling of turbulent hydrogen-air diffusion flames," *Twenty-Seventh Symposium (International) onCombustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1998, pp. 1057-1064.
7. H. Pitsch, H. Barths and N. Peters, "Three-Dimensional Modeling of NOx and Soot Formation in DI-Diesel Engines using Detailed Chemistry Based on the Interactive Flamelet Approach," *SAE Paper* 962057, 1996.
8. P. J. Coelho and N. Peters, "Unsteady Modelling of a Piloted Methane/Air Jet Flame Based on the Eulerian Particle Flamelet Model," *Combustion and Flame*, 124, 2001a, pp. 444-465.
9. F. Liu, H. Guo and G. J. Smallwood, "Evaluation of the Laminar Diffusion Flamelet Model in the Calculation of an Axisymmetric Coflow Laminar Ethylene-Air Diffusion Flame," *Combustion and Flame*, 144, 2006, pp. 605-618.
10. K. Claramunt, R. Consul, D. Carbonell and C. D. Perez-Segarra, "Analysis of the Laminar Flamelet Concept for Nonpremixed Laminar Flames," *Combustion and Flame*, 145, 2006, pp. 845-862.
11. M. Fairweather and R. M. Wooley, "First-Order Conditional Moment Closure Modelling of turbulent, Non-Premixed Methane Flames," *Combustion and Flame*, 138, 2004, pp. 3-19.
12. K. Liu, S. B. Pope and D. A. Caughey, " Calculations of Bluff-Body Stabilized Flames using a Joint Probability Density Function Model with Detailed Chemistry," *Combustion and Flame*, 141, 2005, pp. 89-117.
13. K. W. Lee and D. H. Choi, "Prediction of NO in Turbulent Diffusion Flames using Eulerian Particle Flamelet Model," *Combust. Theor. Model*, 12, 2008, pp. 905-927.

www.SID.ir

Archive of SID

14. K. W. Lee and D. H. Choi, "Analysis of NO Formation in High Temperature Diluted Air Combustion in a Coaxial Jet Flame using an Unsteady Flamelet Model," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52, 2009, pp. 1412-1420.
15. R. W. Bilge, "The Structure of Turbulent Nonpremixed Flames", 22th Symposium (International) on Combustion, *The Combustion Institute*, 1988, pp. 475-488.
16. K. Claramunt, "Numerical Simulation of Non-Premixed Laminar and Furbulent Flames By Means of Flamelet Modelling Approaches", PhD Thesis, Universitat Politècnica de Catalunya, 2005.
17. H. Pitsch and N. Peters, "A Consistent Flamelet Formulation for Non-Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects," *Combustion and Flame*, 114, 1998, pp. 26-40.
18. H. Pitsch, R. Seiser, and B. Vartharajan, "FlmeMaster, A C^{++} Computer Program for O-D ombustion and 1-D laminar Flame Calculations," RWTH Aachen, Germany, 1998, available from http://www.stanford.edu/group/pitsch/Germany, 1998.
19. B. B. Dally, A. R. Masri, R. S. Barlow and G. J. Fiechtner, "Instantaneous and Mean Compositional Structure of Bluff-Body Nonpremixed Flames," *Combustion and Flame*, 114, 1998, pp. 119-148.
20. C. Gibaud, J. A. Snyder, V. Sick, and R. P. Lindstedt, "Laser-Inducedfluorescencem Easurementsa nd Modelling of Absolute CH Concentrationsi n Strained Laminar Methane/Air Flames," *Proceedings of Combustion Inst*., 30, 2005, pp. 455-463.
21. S. K. Sreedhara and Y. Huh, "Modelling of Turbulent Two-Dimensionalnonpremixed CHa/H2 Flame over a Bluffbody using First- and Second-Orderelliptic Conditional Moment Closures," *Combustion and Flame*, 143, 2005, pp. 119-134.

English Abstract

Simulation of a CH4/H2 Diffusion Flame using Unsteady and Steady Flamelet Combustion Models

Fateme Chitgarha[1], Mohsen Davazdah Emami[1] and Mohammad Farshchi[2]
1- Department of Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran
2- Department of Aerospace Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran

(Received: 2014.4.26, Received in revised form: 2015.3.8, Accepted: 2015.3.10)

Reduction of environmental pollutants caused by combustion in power plant systems is one of the main challenges for the researchers. To pinpoint the mechanisms of formation and transport of combustion pollutants, it is necessary to have an accurate prediction of temperature field and combustion products. For this reason, simulation of turbulent combustion flows has attracted much attention in recent years. An appropriate combustion model is required for simulation of these flows. Flamelet model is the most favorite combustion model, due to inherent separation of the turbulent flow field and the chemical reactions. Moreover, the consideration of unsteady flamelet in modeling complex physical phenomena such as radiation heat transfer and slow chemical processes (of pollutants) leads to better results than the steady flamelet assumption. The purpose of this study is to investigate the application of steady and unsteady flamelet models in the simulation of turbulent diffusion bluff body flame. Predictions of temprature and mean mixture fraction using steady flamelet model have shown very good agreement with experiment data. NO mass fraction in steady-state simulations using two different chemical mechanisms GRI3.0 and GRI2.11 is over predicted. While NO mass fraction in the unsteady flamelet modeling using mechanism GRI2.11 have shown good agreement with the experimental data. Thus, unsteady effects are important in slow processes such as the formation of NO.

Keywords: Laminar flamelet model, Diffusion flame, Unsteady flamelet model

www.SID.ir