

## بررسی اثر سازوکار شیمیایی شعله بر مشخصه‌های احتراقی در یک محفظه احتراق مدل توربین گاز

فرزاد بازدیدي طهرانی<sup>۱</sup>، سجاد میرزایی<sup>۲</sup> و محمد صادق عابدی نژاد<sup>۳</sup>

۱- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران (نویسنده مخاطب)، bazdid@iust.ac.ir

۲- کارشناس ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، s\_mirzayi@mecheng.iust.ac.ir

۳- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، sadegh\_abedi@mecheng.iust.ac.ir

(تاریخ دریافت: ۱۳۹۵/۹/۱۴، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۵/۱۲/۱۸، پذیرش: ۹۵/۱۲/۲۲)

**چکیده:** هدف از مقاله حاضر بررسی اثر سازوکارهای شیمیایی متفاوت بر احتراق غیرپیش‌آمیخته سوخت کروسین مایع در یک محفظه احتراق مدل توربین گاز است. شبیه‌سازی عددی جریان دوفاز واکنشی در این محفظه احتراق با مدل آشفته‌گی  $k-\epsilon$  Realizable و مدل احتراقی فلیمت پایا در شبکه‌بندی منظم حجم محدود انجام شده است. از دیدگاه اوپلر- لاگرانژ برای مدل‌سازی پاشش سوخت مایع استفاده شده است. مقاله حاضر با سه سازوکار شیمیایی مختلف برای سوخت کروسین انجام شده است که در سه حالت شرایط مرزی منطبق بر شرایط آزمایشگاهی است. اعتبارسنجی نتایج با مقایسه توزیع سرعت و دما با داده‌های تجربی انجام می‌شود. بر این اساس، نتایج حاصل از سازوکار شیمیایی اول، که شامل ۱۷ گونه شیمیایی و ۲۶ گام واکنشی است، از دقت بیشتری برخوردار بوده و به داده‌های آزمایشگاهی نزدیک‌تر است. همچنین، کمیت‌های نرخ استهلاك اسکالر، کسر مخلوط، کسر جرمی و نرخ تشکیل دی‌اکسیدکربن، بخار آب، کروسین و اکسید نیتروژن در سه سازوکار شیمیایی مختلف مقایسه می‌شوند. نتایج نشان می‌دهند، به دلیل اختلاف در نرخ پیشرفت واکنش‌های شکست  $C_{12}H_{23}$  و نرخ مصرف  $O_2$ ، مقدار کسر مخلوط متوسط، در سازوکارهای شیمیایی مختلف، متفاوت پیش‌بینی می‌شود. نرخ استهلاك اسکالر شعله نیز تحت تاثیر آشفته‌گی جریان در سه سازوکار اختلاف دارد. همچنین، میزان غلظت گونه‌های NO و  $CO_2$  تولیدشده در ناحیه شعله سه سازوکار، به دلیل اختلاف در دمای شعله، متفاوت پیش‌بینی می‌شود.

**کلیدواژگان:** محفظه احتراق مدل توربین گاز، سازوکار شیمیایی، کروسین، جریان واکنشی آشفته، فلیمت

### مقدمه

در مطالعه محفظه احتراق سوخت مایع توربین گاز، مفاهیم پیچیده‌ای اعم از جریان واکنشی، پاشش، جریان آشفته، جریان چندفاز، سازوکار<sup>۱</sup> شیمیایی احتراق، فرایندهای انتقال حرارت جابه‌جایی و تشعشع همراه با برهم‌کنش هر یک با دیگری وجود دارند. دستیابی به توزیع دما و توزیع گونه‌های واکنشی مطلوب در مدل‌سازی یک جریان واکنشی منوط بر به‌کارگیری سازوکارهای شیمیایی منطبق با واقعیت و مدل‌سازی دقیق شعله آشفته است.

مردانی و فضل‌الهی<sup>[۱]</sup> تحقیقاتی در زمینه مدل‌سازی عددی یک محفظه احتراق مدل توربین گاز انجام دادند. وجود دو چرخاننده<sup>۲</sup> از جمله ویژگی‌های این محفظه احتراق است. طی این تحقیق از دو مدل مختلف اضمحلال گردابه مفهومی<sup>۳</sup> (EDC) و تابع چگالی احتمال انتقالی<sup>۴</sup> (TPDF) برای برهم‌کنش جریان آشفته و واکنش شیمیایی استفاده شده است. برای مدل‌سازی

1. Mechanism
2. Swirler
3. Eddy Dissipation Concept
4. Transport Probability Density Function

آشفتگي جريان، دو مدل ناویر-استوکس متوسط‌گيري شده<sup>۱</sup> (RANS) و تنش‌هاي رینولدز<sup>۲</sup> (RSM) به‌صورت دوبعدی به‌کار گرفته شده و یک سازوکار احتراقيي تقليل‌يافته ۱۰۴ واکنشي با ۲۲ گونه برای احتراق متان استفاده شده است. نتايج اين مدل‌سازي نشان می‌دهند که سرعت جريان، غلظت گونه‌ها، دما و کسر مخلوط تطابق خوبی با نتايج تجربي دارند. در حالي که از مدل TPDF استفاده شده، ساختار شعله و غلظت گونه‌ها در نزديکی ورودی محفظه احتراق بهتر پيش‌بینی شده است، در حالي که مدل EDC میدان جريان پايين‌دست را با دقت بيشتري پيش‌بینی کرده است. نکته قابل توجه در اين شبیه‌سازي صرف هزینه محاسباتي بهينه در آن به‌دليل استفاده از مدل دوبعدی با تقارن محوری است.

کیتانو و همکاران [۲] اثر اجزای سوخت بر تبخیر و احتراق قطرات را در یک شبیه‌سازي عددی بررسی کردند. در اين پژوهش از سوخت Jet - A به‌عنوان سوخت اصلی و از سوخت‌هاي یک‌جزئی (ان-دکان)، دوجزئی (ان-دکان و تری‌متیل‌بنزن) و سه‌جزئی (ان-دکان، ایزواکتان و تولوئن) به‌عنوان سوخت‌هاي جایگزین برای Jet - A استفاده شده است. نتايج اين تحقيق نشان می‌دهد که تبخیر سوخت‌هاي جایگزین سه‌جزئی در اولين دوره‌هاي تبخیر سريع‌تر از سوخت‌هاي جایگزین یک‌جزئی است و در دوره‌هاي بعدی، کندتر از سوخت‌هاي جایگزین دوجزئی خواهد بود. بيشتري اختلاف بين تغييرات دمای گاز در اين سه نوع سوخت جایگزین پس از پديده احتراق مشاهده می‌شود که در ادامه با گذر زمان از مقدار آن کاسته می‌شود.

زتروال و همکاران [۳] یک سازوکار شیمیایی جدید برای احتراق سوخت کروسین<sup>۳</sup> با قابليت هماهنگی با ريفت‌هاي آشفتگي RANS و LES<sup>۴</sup> توسعه دادند. سازوکار شیمیایی مذکور با ۲۲ گونه و ۶۵ واکنش برگشت‌پذیر در شبیه‌سازي شعله پيش‌آميخته آرام در بسته نرم‌افزار کمکین<sup>۵</sup> استفاده شده است. طبق بررسی ذکر شده، عملکرد اين سازوکار در پيش‌بینی مشخصه‌هاي شعله از قبيل احتراق پذیری، پخش شعله و کرنش شعله در محدوده وسیعی از دماها، فشارها و نسبت‌هاي تعادلی قابل قبول بوده است. زیني‌وند و بازدیدي طهراني [۴] در یک محفظه احتراق استوانه‌اي اثر تعداد و محل سوراخ‌هاي فواره<sup>۶</sup> هوا را روی احتراق و آلاینده اکسيدهای نیتروژن (NO<sub>x</sub>) بررسی کردند. در اين تحقيق، از مدل احتراقيي نرخ محدود-اضمحلال گردابه<sup>۷</sup> با سوخت کروسین، مدل اویلر-لاگرانژ و جهت‌هاي مجزا<sup>۸</sup> برای جريان دوفاز و تشعشع استفاده شده است. نتايج آن‌ها نشان می‌دهد که با افزایش فاصله محوری سوراخ‌هاي هوا از سوخت‌پاش، آلاینده NO<sub>x</sub> کاهش پیدا می‌کند و به‌طور معکوس، توان حرارتي آن افزایش می‌یابد. همچنین، با افزایش تعداد سوراخ‌هاي فواره، هر دو پارامتر توان حرارتي و آلاینده NO<sub>x</sub> افزایش می‌یابند. بازدیدي طهراني و زیني‌وند [۵] طی مقاله‌اي نشان دادند که مدل غيرپيش‌آميخته تعادلی، به‌همراه تابع چگالي احتمال فرضی بتا، توزیع دما را بهتر از مدل اضمحلال گردابه، به‌ویژه در نزديکی دیوار، پيش‌بینی می‌کند.

هانت و سشاری [۶] پژوهش‌هاي عددی و آزمایشگاهی متعددی برای یافتن سوخت جایگزین برای کروسین انجام دادند. سوخت‌هاي جت، به‌ویژه JetA، JetA1 و JP8، از نوع سوخت‌هاي کروسین‌اند. آن‌ها مخلوطی با ۸۰ درصد وزنی ان-دکان و ۲۰ درصد وزنی ۱-۲-۴-تری‌متیل‌بنزن، به‌عنوان ترکیبی با قابليت جایگزینی برای کروسین، معرفی کردند و آن را سوخت جایگزین آخن<sup>۹</sup> نامیدند. مطالعات آزمایشگاهی آن‌ها در بستر جريان چرخشی مخالف سوخت و هوا انجام شده و سوخت‌هاي آخن و کروسین مقایسه شده‌اند. پارامترهاي شرایط بحرانی خاموش شدن شعله، دما و فشار خوداشتعالی و کسر حجمی دوده در جريان احتراقيي نفوذی آرام<sup>۱۰</sup> محاسبه شده و برای هر دو نوع سوخت یکسان گزارش شده‌اند. نتايج آن‌ها نشان می‌دهد که سازوکار شیمیایی سوخت آخن جایگزین می‌تواند در شبیه‌سازي احتراق غيرپيش‌مخلوط سوخت کروسین به‌کار گرفته شود.

1. Reynolds Averaged Navier Stokes
2. Reynold's Stress Models
3. Kerosene
4. Large Eddy Simulation
5. Chemkin
6. Jet
7. Finite Rate- Eddy Dissipation
8. Discrete Ordinates
9. Aachen surrogate
10. Non-premix

ون جی و گوتھیل [۷] به بررسی پاشش متانول با استفاده از مدل‌های فیلمت همراه با تابع چگالی احتمال فرضی بهبودیافته  $\beta$ PDF و مدل تابع چگالی احتمال انتقالی برحسب روش مونت کارلو پرداختند. در این بررسی، از مدل آشفنگی  $k - \epsilon$  استفاده شد و متانول با مکانیزم شیمیایی شامل ۲۳ گونه و ۱۶۸ واکنش شیمیایی مدل‌سازی شده است. طبق این بررسی، نتایج مدل فیلمت به همراه تابع چگالی احتمال فرضی بهبودیافته  $\beta$ PDF با نتایج حل انتقالی تابع PDF منطبق است. آن‌ها بیان کردند، با در نظر گرفتن جزئیات شیمیایی در مدل‌سازی احتراق، آلاینده‌ها و گونه‌های رادیکالی دقیق‌تر محاسبه می‌شوند.

فیلیپ داگات و همکاران [۸] مطالعاتی بر روی احتراق کروسین TR0 (سوخت هوایی Jet - A1) انجام دادند. در این پژوهش اکسیدشدن کروسین در یک راکتور همزن‌دار<sup>۱</sup> در گستره وسیعی از فشارهای ۱۰ تا ۴۰ اتمسفر و دمای ۷۵۰ تا ۱۱۵۰ کلوین بررسی شده است. در سازوکار احتراقی سوخت ذکر شده، از تعداد زیادی واکنش و گونه‌های میانی استفاده شده است. همچنین، آن‌ها یک هیدروکربن اصلی مانند آن-دکان را در شرایط آزمایشگاهی مشابه مطالعه کردند که نهایتاً غلظت گونه‌های احتراق آزمایشگاهی کاملاً مشابه با اکسید سوخت اصلی حاصل شده است. به علاوه، با توجه به شباهت سازوکار اکسیدشدن آن-دکان و کروسین، یک سازوکار شیمیایی اکسیدشدن آن-دکان با جزئیات کامل به جای سازوکار احتراق کروسین ارائه دادند. این سازوکار شامل ۵۷۳ واکنش شیمیایی و ۹۰ گونه شیمیایی است و بیشتر واکنش‌های آن برگشت‌پذیرند. نهایتاً پیش‌بینی قابل قبولی از غلظت گونه‌های احتراقی در محدوده وسیعی از دما، فشار و نسبت تعادلی‌های مختلف به دست آمده است.

فیلیپ داگات و ساندر اگیل [۹] سازوکار اکسیدشدن و احتراق کروسین نوع جت-ای و کروسین گیاهی را، که در واقع ترکیبی از ۸۰ درصد کروسین و ۲۰ درصد متیل استر روغن کلزا است، به صورت آزمایشگاهی مطالعه کردند. در این آزمایش‌ها از راکتور همزن‌دار با فشار ۱۰ اتمسفر با زمان ماندگاری ثابت و محدوده دمایی ۷۴۰ تا ۱۲۰۰ کلوین و نسبت تعادلی‌های متغیر در محدوده ۰/۵ تا ۱/۵ استفاده شده است. توزیع غلظت واکنش‌دهنده‌ها، گونه‌های پایدار میانی و محصولات نهایی به وسیله نمونه‌برداری نقطه‌ای و تحلیل کروماتوگرافی از جمله نتایج آن‌هاست. همچنین، اکسیدشدن و احتراق سوخت‌های فوق در شرایط مذکور، توسط یک سازوکار شیمیایی، که شامل ۲۰۲۷ واکنش برگشت‌پذیر و ۲۶۳ گونه است، مدل‌سازی شده است. سوخت کروسین گیاهی جایگزین به صورت ترکیبی از آن-هگزادکان و آن-پروپیل سایکلو هگزان و آن-پروپیل بنزن و آن-دکان مدل‌سازی شده است. طبق بررسی صورت‌پذیرفته، سازوکار شیمیایی استفاده‌شده در مدل‌سازی اکسید کروسین جت-ای و کروسین گیاهی نتایج نسبتاً خوبی برای جبهه پیش‌آمیخته کروسین به همراه دارد. نتایج نشان می‌دهد که کروسین گیاهی واکنش‌پذیری نسبتاً بالاتری نسبت به JetA - 1 دارد. در عین حال، اختلافی بین زمان اشتعال برای دو سوخت کروسین جت-ای و کروسین گیاهی مشاهده نشده است. در مقاله‌ای دیگر، فیلیپ داگات و همکاران [۱۰] احتراق کروسین نوع جت-ای و آن-دکان را به صورت آزمایشگاهی و عددی در یک راکتور همزن‌دار با فشار ۱ اتمسفر، زمان ماندگاری<sup>۲</sup> ثابت، محدوده دمایی بالای ۹۰۰ تا ۱۳۰۰ کلوین و نسبت تعادلی‌های متغیر بین ۰/۵ تا ۲ مطالعه کردند. احتراق آن-دکان و کروسین به وسیله یک سازوکار شیمیایی حاوی ۲۰۹ گونه و ۱۶۷۳ واکنش مدل‌سازی شده است. آن‌ها کروسین را با چهار نوع سوخت جایگزین، که عبارتند از ۱۰۰٪ آن-دکان، ۷۴٪ آن-دکان و ۲۶٪ پروپیل بنزن، ۷۴٪ آن-دکان و ۲۶٪ پروپیل سایکلو هگزان، ۷۴٪ آن-دکان و ۱۵٪ پروپیل بنزن و ۱۱٪ پروپیل سایکلو هگزان، مدل‌سازی کردند. طبق نتایج مشخص شد که سوخت سه‌جزئی مناسب‌ترین سوخت جایگزین برای شبیه‌سازی احتراق کروسین است.

گروه تحقیقاتی سامولسن و همکاران [۱۱-۱۳] از سال ۱۹۸۱ تا ۱۹۹۳ تحقیقات تجربی بر یک محفظه احتراق استوانه‌ای مدل انجام دادند. در طول این سال‌ها، محل و نحوه توزیع سوراخ‌های اولیه و ثانویه، بازشدگی ورودی محفظه، سوخت‌های مختلف، دوده و  $NO_x$  به همراه توزیع سرعت، دما و قطرات بررسی شده‌اند. با توجه به وجود اطلاعات هندسی و تجربی که از این تحقیقات موجود است، شبیه‌سازی و تحلیل این هندسه می‌تواند راه‌گشا در مسائل احتراق و پاشش سوخت مایع باشد.

1. Jet stirred reactor (JSR)  
2. Residence times

در کارهای گذشته، از مدل‌های احتراقی مختلفی نظیر اضمحلال گردابه، غیرپیش‌آمیخته تعادلی و فلیملت برای شبیه‌سازی جریان واکنشی استفاده شده است. در هیچ کدام از کارهای پیشین به بررسی تاثیر سینتیک شیمیایی احتراق سوخت بر مدل‌سازی شعله جریان واکنشی در یک محفظه احتراق مدل توربین گاز پرداخته نشده است. در مقاله حاضر، تاثیر سه سازوکار شیمیایی متفاوت سوخت کروسین بر مشخصه‌های احتراقی در یک محفظه احتراق مدل توربین گاز بررسی شده است. در شبیه‌سازی عددی جریان دوفاز واکنشی این محفظه احتراق مدل از مدل آشفتگی  $k-\varepsilon$  Realizable، مدل احتراقی فلیملت پایا<sup>۱</sup> و مدل تشعشعی جهات مجزا<sup>۲</sup> استفاده می‌شود. پاشش قطرات سوخت مایع و محیط دوفازی قطره و هوا توسط روش اویلر-لاگرانژ<sup>۳</sup> مدل‌سازی می‌شوند. در مقاله حاضر، شبیه‌سازی احتراق با سه سازوکار شیمیایی مختلف انجام شده است که در هر سه حالت تمام شرایط مرزی منطبق بر شرایط آزمایشگاهی [۱۱] است. پس از اعتبارسنجی نتایج حل عددی با داده‌های تجربی، دقت سازوکارها بررسی و مقایسه شده است. نتایج به‌دست آمده از مقاله حاضر شامل توزیع سرعت، دما، نرخ استهلاک اسکالر شعله، کسر مخلوط، کسر جرمی و نرخ تشکیل گونه‌های دی‌اکسید کربن، بخار آب، کروسین و اکسید نیتروژن در مقاطع مختلف محفظه احتراق مدل است.

## معادلات حاکم

### فاز پیوسته

معادله‌های حاکم بر جریان واکنشی آشفته شامل معادله بقای جرم، بقای تکانه، بقای انرژی و بقای جرم اجزای واکنشی است. شکل کلی معادلات در مختصات دکارتی، پایا و غیرقابل تراکم به‌صورت معادله (۱) است.

$$\frac{\partial}{\partial X}(\rho U \Psi) + \frac{\partial}{\partial Y}(\rho V \Psi) + \frac{\partial}{\partial Z}(\rho W \Psi) = \frac{\partial}{\partial X} \left( \Gamma_{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left( \Gamma_{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial Y} \right) + \frac{\partial}{\partial Z} \left( \Gamma_{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial Z} \right) + S_{\Psi 1} + S_{\Psi 2} \quad (1)$$

$\Psi$  بیانگر متغیرهای وابسته شامل جرم، تکانه، انرژی جنبشی آشفتگی، نرخ اضمحلال انرژی آشفتگی، آنتالپی و کسر جرمی گونه‌هاست. دو پارامتر  $S_{\Psi 1}$  و  $S_{\Psi 2}$  به ترتیب عبارات چشمه و چاه برای فاز گازی و فاز قطرات‌اند.

### فاز گسسته

فاز پیوسته در این مدل‌سازی جریان گاز است که به‌صورت اویلری مدل می‌شود. در ناحیه نزدیک به سوخت‌پاش، به‌دلیل پاشش قطرات که در محدوده میکرومترند و کسر حجمی آن‌ها کمتر از ۱۰ درصد کسر حجمی فاز گازی می‌شود، فاز گسسته‌ای ایجاد می‌شود که برای مدل‌کردن آن از دیدگاه لاگرانژی استفاده می‌شود. مسیر حرکت قطرات از معادله حرکت به‌دست می‌آید [۱۴].

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = F_D(\vec{u} - \vec{u}_p) \quad (2)$$

عبارت سمت چپ، اینرسی یک قطره است که شرح‌دهنده مقاومت جرم برای تغییر سرعت و جهت آن است. عبارت سمت راست شرح‌دهنده نیروی پسای اصطکاکی است. مدل دمای تعادلی برای مدل‌کردن دمای قطره استفاده شده است. فرض شده است که تغییر دما درون قطره وجود ندارد و دمای داخل قطره همگن است [۱۵، ۱۴]. بنابراین، قطرات گسسته‌سازی نمی‌شوند و هزینه محاسبات کاهش می‌یابد. نرخ تبخیر  $\frac{dm_p}{dt}$  از طریق رابطه انتقال جرم اطراف قطره محاسبه می‌شود [۱۷، ۱۶].

$$\frac{dm_p}{dt} = \pi d_p \rho_{\infty} D_{i,m} Sh_{AB} \ln(1 + B_m) \quad (3)$$

که  $d_p$  قطر قطره،  $\rho_{\infty}$  چگالی فاز گازی و  $D_{i,m}$  ثابت نفوذ بخار در فاز گاز است.  $Sh_{AB}$  و  $B_m$  به ترتیب عدد شرود و عدد جرم اسپالدینگ<sup>۴</sup> هستند. دمای قطره نیز براساس معادله تعادل حرارتی قطره به‌روزرسانی می‌شود. در این معادله،

1. Steady Flamelet Combustion Model
2. Discrete Ordinate Radiation Model
3. Euler- Lagrangian Method
4. Sherwood number

دمای فاز پیوسته، نرخ تبخیر و حرارت تغییر فازند.  $h_{fg}, C_p, T_p, h, T_\infty, \frac{dm_p}{dt}$  به ترتیب ظرفیت گرمای ویژه قطره در فشار ثابت، دمای قطره، ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی،

$$m_p C_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) - \frac{dm_p}{dt} h_{fg} \quad (۴)$$

سوخت در دمای ۳۰۰ کلوین با سرعت نسبی ۱۱۰ متر بر ثانیه و زاویه ۳۰ درجه از یک سوخت‌پاش هوا-انفجاری<sup>۲</sup> به درون محفظه پاشیده می‌شود. با توجه به این که کسر حجمی قطرات کوچک‌تر از ۰/۰۰۱ است، لذا نیازی به محاسبه برخورد قطرات با یکدیگر نیست. به عبارت دیگر، تاثیرپذیری یک قطره از دیگر قطرات ناچیز است. در عین حال، وجود فاز گسسته بر روی فاز اصلی تاثیرگذار است و بایستی این تاثیرگذاری در معادلات فاز پیوسته به صورت یک عبارت چشمه لحاظ شوند. اطلاعات بیشتر در خصوص نحوه مدل‌سازی فاز گسسته و معادلات حاکم بر آن در مراجع [۱۷] تا [۲۰] ذکر شده است.

### مدل آشفنگی

مطابق تحقیقات گذشته [۴]، در مقاله حاضر، از مدل Realizable  $k - \varepsilon$  برای مدل‌سازی آشفنگی جریان در محفظه احتراق مدل توربین گاز استفاده می‌شود. معادلات انتقال در مدل آشفنگی مذکور توسط شیخ و همکاران [۲۱] ارائه شده است که به صورت روابط (۵) و (۶) است. پارامتر  $\eta$  بیان‌کننده نسبت زمان مشخصه آشفنگی به زمان مشخصه میدان جریان،  $k$  انرژی جنبشی و  $\varepsilon$  نرخ اضمحلال است.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + G + B - \rho \varepsilon \quad (۵)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] + \rho C_1 S \varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\frac{\mu \varepsilon}{\rho}}} \quad (۶-الف)$$

$$C_1 = \max \left[ 0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right], \eta = S \frac{k}{\varepsilon} \quad (۶-ب)$$

$$S = \sqrt{2 S_{i,j} S_{i,j}}, \mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (۶-ج)$$

$$C_2 = 1.9, \sigma_k = 1.0, \quad \sigma_\varepsilon = 1.2 \quad (۶-د)$$

### مدل احتراقی

در مقاله حاضر، مدل‌سازی واکنش‌های شیمیایی محفظه احتراق مدل با استفاده از مدل احتراقی فلیملت پایا انجام می‌شود. جریان آشفته و جریان احتراقی غیرپیش‌آمیخته با استفاده از تابع چگالی احتمال فرضی بتا<sup>۳</sup> مرتبط می‌شوند. در مدل احتراقی فلیملت فرض می‌شود که شعله نفوذی آشفته به صورت یک مجموع آماری از شعله‌های کوچک (فلیملت‌های) آرام است [۲۲]. روابط (۷) و (۸) معادلات فلیملت (معادلات کسر جرمی و دما) در مختصات کسر مخلوط را ارائه می‌دهند [۲۳]. در این معادلات،  $Y_i$  نسبت جرمی گونه  $i$ ،  $c_{p,i}$  گرمای ویژه گونه  $i$  و  $c_p$  گرمای ویژه میانگین ترکیب است.  $S_i$  نیز نرخ واکنش،  $H_i$  آنتالپی ویژه گونه  $i$  و پارامتر  $\chi$  نرخ استهلاک اسکالر است.

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Y_i}{\partial f^2} + S_i \quad (۷)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 T}{\partial f^2} - \frac{1}{c_p} \sum_i H_i S_i + \frac{1}{2 c_p} \rho \chi \left[ \frac{\partial c_p}{\partial f} + \sum_i c_{p,i} \frac{\partial Y_i}{\partial f} \right] \frac{\partial T}{\partial f} \quad (۸)$$

1. Spalding mass transfer number  
2. Airblast  
3.  $\beta$ PDF

برای به‌دست آوردن توزیع نرخ استهلاک اسکالر در شعله، معادله بقای کسر مخلوط در شعله‌های نفوذی جریان مخالف به‌کمک روش تشابهی حل می‌شود. نرخ استهلاک اسکالر برحسب کسر مخلوط و نرخ واکنش در هر نقطه به‌صورت بسط (۹) با چگالی متغیر قابل محاسبه است. در این معادلات، دما و کسر جرمی گونه‌ها در حالت پایا تابعی از کسر مخلوط و کمیت غیرتعادلی نرخ استهلاک اسکالر بوده که بیانگر اثر میدان جریان روی ساختار فلیملت است. توزیع گونه‌ها و دما در حالت پایا به‌صورت تابعی از کسر مخلوط و نرخ استهلاک اسکالر (رابطه (۱۰)) تعریف می‌شوند.

$$\chi(f) = \frac{\alpha_s}{4\pi} \frac{3 \left( \sqrt{\rho_\infty/\rho} + 1 \right)^2}{2 \sqrt{\rho_\infty/\rho} + 1} \exp(-2[\operatorname{erfc}^{-1}(2f)]^2) \quad (9)$$

$$Y_i = Y_i(f, \chi) \quad (10)$$

$$T = T(f, \chi)$$

بدین ترتیب، معادلات فلیملت (۷) و (۸) در فضای کسر مخلوط، همراه با شرایط مرزی تعریف‌شده و همچنین داشتن یک سینتیک شیمیایی احتراقی سوخت برای مقادیر مختلف نرخ استهلاک اسکالر قابل انتگرال‌گیری است. مقادیر کسر مخلوط و واریانس آن از حل معادلات انتقال آن‌ها به‌دست می‌آیند [۲۴]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho f}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho u}_j \bar{f}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_t \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_j} \right] \quad (11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho f^2}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho u}_j \bar{f^2}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_t \frac{\partial \bar{f^2}}{\partial x_j} \right] + C_g \mu_t \left( \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_j} \right)^2 - C_\chi \bar{\rho} \bar{\chi} \quad (12)$$

نرخ استهلاک اسکالر استوکیومتری با در نظرگیری اثرات آشفتگی جریان براساس رابطه (۱۳) محاسبه می‌شود [۱۴]. در این رابطه،  $k$  انرژی جنبشی آشفته،  $\varepsilon$  استهلاک آشفته و ضریب  $c_\chi$  معمولاً برابر با ۲ در نظر گرفته می‌شود [۲۵]. توضیحات بیشتر در خصوص مدل فلیملت در مراجع [۲۶] تا [۲۸] ذکر شده است.

$$\bar{\chi}_{st} = \bar{\chi}, \quad \bar{\chi} = c_\chi \frac{\varepsilon}{k} \bar{f^2} \quad (13)$$

### سازوکار شیمیایی احتراق

سازوکار یک واکنش شیمیایی در واقع زنجیره‌ای از رویدادهایی است که طی آن مولکول‌های واکنش‌دهنده اولیه به محصول تبدیل می‌شوند. هر یک از این رویدادها یک گام است که می‌توان آن را به‌شکل به‌هم رسیدن اجزاء گسسته (تصادم) و یا شکست (تجزیه) مولکولی به ساده‌ترین مولکول ممکن نشان داد. مولکولی که در هر یک از گام‌ها پدیدار می‌شود ممکن است یک محصول نهایی واکنش و یا یک گونه میانی<sup>۱</sup> باشد. واکنش‌هایی که شامل یک تا سه گونه شیمیایی می‌باشند، واکنش‌های مقدماتی نامیده می‌شوند. واکنش‌های مقدماتی در دو مورد با واکنش‌های شیمیایی نهایی<sup>۲</sup> تفاوت دارند:

الف- نرخ یک واکنش مقدماتی از یک رابطه ساده به‌دست می‌آید. برای مثال یک فرآیند دو مولکولی همواره از رابطه نرخ تولید مرتبه دوم به‌شکل معادله (۱۴) پیروی می‌کند.

$$\text{Rate} = k[A][B] \quad (14)$$

ب- واکنش‌های مقدماتی اغلب شامل گونه‌های ناپایدار و به‌شدت واکنش‌دهنده‌اند که در معادله نهایی ظاهر نمی‌شوند. به سازوکارهایی که در آن‌ها یک گام توسط چند گام دیگر دنبال می‌شود واکنش‌های چندمرحله‌ای گفته می‌شود. در جدول ۱ گونه نیترات<sup>۳</sup> ( $\text{NO}_3$ ) یک گونه میانی است که معمولاً ناپایدار یا به‌شدت واکنش‌پذیر است. اگر هر دو گام با نرخ‌های متشابه

1. Intermediate species  
2. Ordinary net chemical reaction  
3. Nitrate

دنبال شوند، رابطه نرخ واکنش تجربی با دو مرحله جداگانه‌ای که در این واکنش وجود دارد درگیر نخواهد شد. زمانی که نرخ دو گام با هم متفاوت باشد، مسئله پیچیده‌تر خواهد شد، چرا که یک سازوکار کاملاً متفاوت در پی خواهد داشت، به طوری که نیاز به برخی تقریب‌های ساده‌کننده مانند گام تعیین‌کننده نرخ، تعادل سریع و تقریب حالت پایدار<sup>۱</sup> است [۲۹].

جدول ۱- سازوکار شیمیایی تجزیه نیتروژن دی اکسید به نیتریک اکسید و اکسیژن [۲۹]  
Table 1- Chemical mechanism of decomposition of nitrogen dioxide into nitric oxide and oxygen [29]

First step	$2\text{NO}_2 \rightarrow \text{NO}_3 + \text{NO}$
Second step	$\text{NO}_3 \rightarrow \text{NO} + \text{O}_2$
Net reaction	$2\text{NO}_2 \rightarrow 2\text{NO} + \text{O}_2$

در گام‌های متوالی، گام مقدماتی که نسبت به سایر گام‌ها نرخ ثابت کندتری داشته باشد، تعیین‌کننده نرخ کلی واکنش است و آن را محدود می‌کند. در بسیاری از فرایندهای چندمرحله‌ای، برای اینکه واکنش بتواند در هر جهتی به اندازه کافی سریع حرکت کند، نرخ ثابت پیشروی و پسروی برای تشکیل گونه میانی (Q) مقادیر یکسان و بزرگی دارد. این درحالی است که تجزیه گونه میانی به محصول نهایی یک فرایند کند است.



این نمونه اغلب به عنوان یک تعادل سریع معرفی می‌شود، به طوری که غلظت Q متناسب با ثابت تعادلی  $K = K_1/K_2$  است. البته این مسئله باید درک شود که تعادل واقعی هیچ‌گاه تحقق نمی‌یابد، چرا که Q پیوسته در حال مصرف است. به همین خاطر است که نرخ تشکیل Q همواره از نرخ تجزیه آن تجاوز می‌کند. به همین دلیل، تقریب حالت پایدار، که در ادامه توضیح داده خواهد شد، عموماً برای فرایندهایی از این قبیل ترجیح داده می‌شود.

گونه Q یک گونه میانی در معادله سازوکار (۱۶) است که این سازوکار شامل دو واکنش پی‌درپی است. همان‌طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، توزیع غلظت-زمان این سه ماده به مقدار نسبی  $K_1$  و  $K_2$  بستگی خواهد داشت.

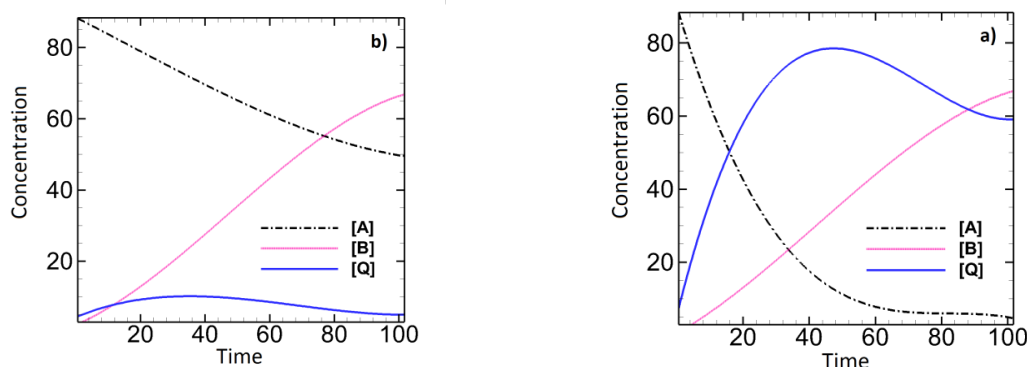


Figure 1- The steady-state approximation a)  $k_1 \gg k_2$ , b)  $k_1 \ll k_2$   
شکل ۱- تقریب حالت پایدار: الف)  $k_1 \gg k_2$ ، ب)  $k_1 \ll k_2$

در شکل a-۱، به دلیل زیادبودن مقدار  $k_1$  گونه میانی (Q) به سرعت در حال تشکیل است، اما در اثر کمبود  $k_2$  نسبت به  $k_1$  تبدیل گونه میانی به محصول نهایی به کندی صورت می‌گیرد. در نتیجه، تبدیل گونه میانی به محصول نهایی گام کنترل‌کننده نرخ کلی است. بنابراین، حتی نیاز به فرمولاسیون یک رابطه نرخ، که شامل Q شود، نیست. اما، در شکل b-۱

1. The steady-state approximation

تشکیل گونه Q تعیین کننده نرخ کلی واکنش است، زیرا تبدیل Q به محصول نهایی (B) خیلی سریع است، به طوری که غلظت Q هیچگاه به یک مقدار قابل توجه نمی‌رسد. همان‌طور که در شکل b-1 مشاهده می‌شود، غلظت دو گونه A و B برعکس یکدیگر است. عامل اصلی این موضوع ثبات غلظت Q در یک مقدار تقریباً پایاست. در نهایت، این تقریب حالت پایدار می‌تواند اساساً منجر به ساده‌سازی تحلیل بسیاری از سازوکارهای شیمیایی شود.

فرایند اکسیدشدن هیدروژن در هر سه سازوکار مورد استفاده در این مطالعه وجود دارد. این واکنش زمانی که دو گاز در اتاقی با وضعیت طبیعی قرار بگیرند رخ نمی‌دهد. در دمای حدود ۵۰۰ تا ۶۰۰ درجه سانتی‌گراد این واکنش به آرامی شروع می‌شود، اما با گرمایش تا دمای بالاتر از ۷۰۰ درجه سانتی‌گراد یا با اشتعال از طریق جرعه مخلوط منفجر می‌شود. همانند همه واکنش‌های احتراقی سازوکار این واکنش نیز اساساً پیچیده است. به طوری که ارائه یک رابطه مستقل برای نرخ پیشرفت آن غیرممکن است، زیرا سازوکار به شدت تحت تاثیر شرایط تغییر می‌کند. در این نمونه خاص از واکنش  $H_2$  و  $O_2$  تعدادی از عمده‌ترین گام‌های تشکیل رادیکال مطابق جدول ۲ هستند. واکنش‌های ۳ و ۴ موجب تولید هرچه بیشتر رادیکال‌ها نسبت به میزان مصرف آن‌ها می‌شوند. زیرا، وقتی این دو گام فعال‌اند هر یک به‌طور موثر آغاز یک فرایند زنجیره‌ای جدید را در پی دارند و موجب افزایش نمایی نرخ پیشروی کل می‌شوند که نهایتاً منجر به انفجار می‌شود.

جدول ۲- سازوکار شیمیایی اکسیدشدن گاز هیدروژن

Table 2- Chemical mechanism of oxidation hydrogen gas

$H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$	$\Delta H^\circ = -242 \text{ kJ/mol}$
1) $H_2 + O_2 \rightarrow HO_2 \cdot + H \cdot$	Chain initiation
2) $H_2 + HO_2 \cdot \rightarrow HO \cdot + H_2O$	Chain propagaton
3) $H \cdot + O_2 \rightarrow HO \cdot + O \cdot$	Chain propagaton + Branching
4) $O \cdot + H_2 \rightarrow HO \cdot + H \cdot$	Chain propagaton + Branching
5) $HO \cdot + H_2 \rightarrow H_2O + H \cdot$	Chain propagaton

یک واکنش انفجاری یک فرایند بسیار گرم‌است که یک‌باره آغاز می‌شود، تا انتها پیش می‌رود و قابل متوقف‌کردن نیست. نیروی مخرب یک انفجار با انبساط محصولات آن افزایش می‌یابد. نظر به اینکه گازها حرارت ناشی از واکنش را جذب کنند، دو نوع اصلی در انفجارهای شیمیایی وجود دارد:

- 1) انفجار حرارتی: زمانی رخ می‌دهد که حرارت آزاد شده طی یک واکنش خیلی سریع‌تر از محصولات شیمیایی آن واکنش از فضای واکنش خارج شوند. این باعث می‌شود که فرایند واکنش خیلی سریع‌تر رخ دهد و حتی گرمای بیشتری آزاد کند. در نتیجه یک نرخ افسارگسیخته در تحولات پرشتاب خواهیم داشت.
- 2) انفجار زنجیره‌ای-انشعایی: زمانی رخ می‌دهد که تعداد زنجیره‌های یک واکنش زنجیره‌ای به‌صورت نمایی افزایش یابد. در این حالت، به‌طور موثر مراکز واکنشی جدید در مخلوط بذرافشانی شده و نهایتاً این فرایند تبدیل به یک انفجار حرارتی می‌شود.

در مقاله حاضر، سه سازوکار شیمیایی مختلف، مطابق جدول‌های ۳، ۴ و ۵، برای مدل‌سازی احتراق سوخت کروسین استفاده شده است، تفاوت اصلی این سه سازوکار در تعداد گونه‌ها، تعداد واکنش‌ها، انرژی فعال‌سازی واکنش‌ها و ضریب فرکانسی<sup>۱</sup> است. شرایط سه حالت مدل‌سازی در جدول ۶ ذکر شده است. در حالت اول، احتراق با سازوکار شیمیایی ۲۸ واکنشی، که شامل ۱۸ گونه مستقل است، شبیه‌سازی می‌شود. در حالت دوم، از سازوکار شیمیایی تعادلی‌تر نسبت به حالت اول استفاده می‌شود که دارای ۲۱ گونه مستقل و ۳۰ واکنش شیمیایی است. در حالت سوم نیز، شبیه‌سازی احتراق با سازوکاری شبیه به سازوکار حالت اول انجام می‌شود و دارای ۲۸ واکنش شیمیایی و ۱۷ گونه مستقل است. تفاوت اصلی در

1. Pre-exponential factor or Frequency factor



سازوکار حالت اول و سوم اختلاف در ضرایب مدل آرنیوسی برای هر یک از واکنش‌ها در این دو سازوکار است. سازوکار دوم دارای گونه‌ها و واکنش‌های میانی بیش‌تری نسبت به دو سازوکار دیگر است. نظر به اینکه افزایش تعداد فلیمت‌ها موجب افزایش زمان و هزینه محاسباتی می‌شود، برای ساخت فلیمت از هر یک از سازوکارهای شیمیایی ایدئال‌ترین حالت در نظر گرفته می‌شود.

### مدل سازی انتقال حرارت تشعشع

در محفظه‌های احتراق، به دلیل وجود سطوح و گازهای مختلف نشردهنده و جذب‌کننده شارهای حرارتی تابشی، نیاز به مدلی است که انتقال حرارت تابشی را با دقت کافی و هزینه محاسباتی مناسب تقریب بزند. بعضی از مدل‌های انتقال حرارت تشعشعی عبارت‌اند از: مدل انتقال تابش مجزا<sup>۱</sup>، مدل  $P - 1$ ، مدل رزلند و مدل جهات مجزا. در این مقاله، به دلیل دقت و هزینه محاسباتی معقول، از مدل جهات مجزا استفاده شده است. با توجه به تغییرات دایمی دما، فشار، غلظت گونه‌ها در احتراق و گازهای حاصل از آن، ثابت‌گرفتن ضریب جذب باعث کاهش دقت محاسبات می‌شود. لذا، در این تحقیق، از مدل توزیع وزنی مجموع گازهای خاکستری، که توسط اسمیت و همکاران [۳۳] پیشنهاد شده، برای به‌دست آوردن ضریب جذب گازهای حاصل از احتراق استفاده شده است. در مراجع [۱۴] و [۳۴] توضیحات بیشتری در این خصوص ارائه شده است.

جدول ۳- سازوکار شیمیایی اول [۳۰]

Table 3- The first chemical mechanism[30]

No.	$k = AT^b \exp(-E/RT)$	A (1/s)	b	E (cal/mole)
1	$N_2 + C_{12}H_{23} \rightarrow 12CH + 11H + N_2$	4.35E + 09	0.0	30000
2f	$CH + H_2 + N_2 \rightarrow 2NH + CH$	1.00E + 15	0.0	78000
2b	$CH + 2NH \rightarrow CH + H_2 + N_2$	1.95E + 15	0.0	0
3	$H_2 + OH \leftrightarrow H + H_2O$	2.16E + 08	1.5	3430
4	$H_2 + O \leftrightarrow H + OH$	3.87E + 04	2.7	6260
5	$H + O_2 \leftrightarrow O + OH$	2.65E + 16	-0.7	17041
6f	$N_2 + O_2 \rightarrow 2O + N_2$	1.00E + 18	0.0	122239
6b	$H_2 + 2O \rightarrow O_2H_2$	1.00E + 18	0.0	0
7	$H_2 + 2H \leftrightarrow 2H_2$	9.00E + 16	-0.6	0
8	$H + O_2 \leftrightarrow HO_2$	1.00E + 15	-1.01	0
9	$H + HO_2 \leftrightarrow H_2 + O_2$	4.48E + 13	0.0	1068
10	$O + HO_2 \leftrightarrow OH + O_2$	2.00E + 13	0.0	0
11	$CO + HO_2 \leftrightarrow CO_2 + OH$	1.50E + 14	0.0	23600
12	$CO + OH \leftrightarrow CO_2 + H$	4.76E + 07	1.2	70
13	$CH + O \leftrightarrow CO + H$	5.70E + 13	0.0	0
14	$CH + OH \leftrightarrow CO + H_2$	3.00E + 13	0.0	0
15	$CH + NO \leftrightarrow NH + CO$	1.00E + 11	0.0	0
16	$N_2 + 2CH \leftrightarrow C_2H_2 + N_2$	1.00E + 14	0.0	0
17	$C_2H_2 + O_2 \leftrightarrow 2CO + H_2$	3.00E + 16	0.0	19000
18	$N_2 + O \leftrightarrow N + NO$	6.50E + 13	0.0	75000
19	$N + O_2 \leftrightarrow NO + O$	9.00E + 09	1.0	6500
20	$N + OH \leftrightarrow NO + H$	3.36E + 13	0.0	385
21	$NH + NO \leftrightarrow N_2O + H$	3.65E + 14	-0.5	0
22	$N_2O + OH \leftrightarrow N_2 + HO_2$	2.00E + 12	0.0	21060
23	$N_2O + O \leftrightarrow 2NO$	2.90E + 13	0.0	23150
24	$N_2O + O \leftrightarrow N_2 + O_2$	1.40E + 12	0.0	10810
25	$N_2O + H \leftrightarrow N_2 + OH$	3.87E + 14	0.0	18880
26	$NH + O \leftrightarrow NO + H$	4.00E + 13	0.0	0

جدول ۴- سازوکار شیمیایی دوم [۳۱]

Table 4- The second chemical mechanism [31]

No.	$k = AT^b \exp(-E/RT)$	A (1/s)	b	E (cal/mole)
1	$C_{12}H_{23} + O_2 \rightarrow 5C_2H_4 + C_2H_3 + O_2$	30199.52	1.5	15698
2	$C_{12}H_{23} + OH \rightarrow 6C_2H_4 + O$	19952623.15	1.0	8942
3	$C_2H_4 + H \rightarrow C_2H_3 + H_2$	30199517204.02	0.0	18878
4	$H + H + M \rightarrow H_2 + M$	1995262314968.88	-1.0	0.0
5	$O + O + M \rightarrow O_2 + M$	100000000000	-1.0	0.0
6	$H + OH + M \rightarrow H_2O + M$	70794578438413.8	-1.0	0.0
7	$H + O_2 \rightarrow OH + O$	223872113856.84	0.0	16692
8	$O + H_2 \rightarrow OH + H$	17378008287.5	0.0	9400
9	$CO + OH \rightarrow CO_2 + H$	1.78E - 15	7.0	-13910
10	$H + H_2O \rightarrow OH + H_2$	83176377110.27	0.0	19971
11	$CH_3 + O_2 \rightarrow CH_2O + OH$	1000000000	0.0	7948
12	$HO_2 + M \rightarrow H + O_2 + M$	2089296130854.04	0.0	45705
13	$HO_2 + H \rightarrow OH + OH$	7762471166.29	0.0	1888
14	$CH_2O + OH \rightarrow H_2O + HCO$	79432823472.4	0.0	4213
15	$O + H_2O \rightarrow OH + OH$	57543993733.71	0.0	17884
16	$N_2 + O \rightarrow NO + N$	1000000000	0.0	49680
17	$N + O_2 \rightarrow NO + O$	100000	1.0	3974
18	$N + OH \rightarrow NO + H$	1000000000	0.0	0.0
19	$HCO + O_2 \rightarrow HO_2 + CO$	30199517204.02	0.0	13910
20	$HCO + OH \rightarrow H_2O + CO$	19952623149.69	0.0	0.0
21	$C_2H_4 + OH \rightarrow C_2H_3 + H_2O$	6025595860.743	0.0	3478
22	$CH_2O + HO_2 \rightarrow HCO + OH + OH$	1000000000	0.0	8942
23	$C_2H_2 + HO_2 \rightarrow HCO + CH_2O$	1995262314.97	0.0	10930
24	$C_2H_3 + O_2 \rightarrow C_2H_2 + HO_2$	1698243652.46	0.0	9936
25	$NO + HO_2 \rightarrow NO_2 + OH$	1000	1.0	0.0
26	$C_2H_4 + O \rightarrow CH_3 + HCO$	8511380382.024	0.0	2980
27	$C_2H_4 + HO_2 \rightarrow CH_3 + HCO + OH$	7943282347.243	0.0	9936
28	$H_2 + CH_3 \rightarrow CH_4 + H$	10000000	-1.5	14190
29	$C_2H_2 + OH \rightarrow CH_3 + CO$	158489319.25	0.0	4968
30	$CH_3 + O \rightarrow CH_2O + H$	128824955169.31	0.0	1987

جدول ۵- سازوکار شیمیایی سوم [۳۲]

Table 5- The third chemical mechanism [32]

No.	$k = AT^b \exp(-E/RT)$	A (1/s)	b	E (cal/mole)
1	$H_2 + OH \leftrightarrow H + H_2O$	1.17E + 11	1.1	3626
2	$H_2 + O \leftrightarrow H + OH$	2.50E + 15	0	6000
3	$H + O_2 \leftrightarrow O + OH$	4.00E + 14	0	18000
4f	$N_2 + O_2 \rightarrow 2O + N_2$	1.00E + 18	0	122239
4b	$H_2 + 2O \rightarrow O_2 + H_2$	5.00E + 17	0.5	0
5	$H_2 + 2H \leftrightarrow 2H_2$	4.00E + 20	-1	0
6	$H + O_2 \leftrightarrow HO_2$	1.00E + 15	-1.1	0
7	$O + HO_2 \leftrightarrow OH + O_2$	1.50E + 13	0	0
8	$H + HO_2 \leftrightarrow H_2 + O_2$	1.50E + 13	0	0
9	$CO + OH \leftrightarrow CO_2 + H$	4.17E + 11	0	1000
10	$CO + HO_2 \leftrightarrow CO_2 + OH$	5.80E + 13	0	22934
11	$CH + O \leftrightarrow CO + H$	1.00E + 10	0.5	0
12	$CH + NO \leftrightarrow NH + CO$	1.00E + 11	0	0
13	$CH + O_2 \leftrightarrow CO + OH$	3.00E + 10	0	0
14	$C_2H_2 + O_2 \leftrightarrow 2CO + 2H$	3.00E + 12	0	49000
15	$N_2 + 2N \leftrightarrow N_2 + N_2$	1.00E + 15	0	0
16	$N + O_2 \leftrightarrow NO + O$	6.30E + 09	1.0	6300
17	$N + OH \leftrightarrow NO + H$	3.00E + 13	0	0
18	$NH + O \leftrightarrow NO + H$	1.50E + 13	0	0
20	$NH + NO \leftrightarrow N_2 + OH$	2.00E + 15	-0.8	0
21	$O + N_2 + HO_2 \rightarrow 2NO + O + H$	1.50E + 07	1.0	45900
22	$2NO + H \leftrightarrow N_2 + HO_2$	2.50E + 10	0.16	8000
23f	$N_2 + O \leftrightarrow NO + N$	4.75E + 10	0.29	75010
23b	$N + NO \leftrightarrow N_2 + O$	3.00E + 12	0.2	0
24f	$N_2 + H_2 + 2CH \rightarrow 2CH + 2NH$	1.00E + 16	0	78000
24b	$2CH + 2NH \rightarrow N_2 + H_2 + 2CH$	1.95E + 15	0	0
25	$C_{12}H_{23} + N_2 \rightarrow 11H + 6C_2H_2 + N_2$	2.50E + 09	0	30000
26	$C_{12}H_{23} + N_2 \rightarrow 12CH + 11H + N_2$	2.50E + 10	0	30000

جدول ۶- مشخصات حالت‌های مطالعاتی

Cases	Chemical kinetics	Number of species	Number of reactions	Number of flamelet	Last scalar dissipation
Case – A	Table (3)	17	26	28	13
Case – B	Table (4)	21	30	3	0.01
Case – C	Table (5)	16	26	11	19.1

## حل گر محاسباتی

شبیه‌سازی جریان در بسته نرم‌افزاری انسیس فلونت ۱۶ [۱۴] انجام می‌شود. برای حل معادله بقای پیوستگی، انرژی، تکانه، معادلات مدل احتراقی، فاز گسسته و تشعشع گرمایی از روش حجم محدود در سه بعد استفاده می‌شود. معادلات حاکم بر جریان به صورت ضمنی خطی سازی و به صورت مرتبه دو گسسته‌سازی می‌شوند. معیار همگرایی حل معادلات  $10^{-6}$  در نظر گرفته می‌شود. جملات نفوذی در معادلات، با استفاده از روش اختلاف مرکزی<sup>۲</sup> و عبارات جابه‌جایی، به صورت مرتبه دو بالادست<sup>۳</sup> گسسته می‌شوند. الگوریتم سیمپل C [۱۴] متغیر سرعت و فشار را متصل می‌کند. برای پیش‌بینی مشخصه‌های دینامیکی گاز و قطرات، یک فرمولاسیون اوپلری برای فاز پیوسته اتخاذ می‌شود و یک فرمولاسیون لاگرانژی برای پی‌گیری حرکت و رفتار ترمودینامیکی فاز گسسته اعمال می‌شود. برای محاسبه گرمای ویژه گونه‌ها نیز از توابع چندجمله‌ای وابسته به دما استفاده می‌شود. در کار حاضر، دو نوع  $NO_x$  حرارتی و فوری محاسبه می‌شوند. برای محاسبه  $NO_x$  حرارتی از سازوکار توسعه‌یافته زلدوویچ [۳۵] و برای محاسبه رادیکال‌های O و OH، از فرض تعادل جزئی استفاده می‌شود [۳۶]. نرخ تشکیل  $NO_x$  فوری<sup>۴</sup> از رابطه ارائه‌شده توسط دسویت [۳۷] به‌دست می‌آید. برای کسب اطلاعات بیشتر در خصوص نحوه محاسبه  $NO_x$ ، مراجع [۴]، [۱۴] و [۳۶] مفید خواهند بود.

## هندسه و شرایط مرزی

در مقاله حاضر، از هندسه محفظه احتراق استوانه‌ای مدل کامرون و همکاران [۱۱] برای بررسی مشخصه‌های جریان پاششی-واکنشی استفاده شده است. شکل ۲ طرحواره محفظه احتراق مدل و جدول ۷ مشخصه‌های محفظه احتراق مدل را نشان می‌دهد. شرایط مرزی در ورودی و خروجی دامنه محاسباتی به ترتیب جریان جرمی ورودی و فشار خروجی لحاظ شده‌اند. شرایط مرزی گرمایی و سرعت دیوار نیز، به ترتیب، بی‌دررو و عدم لغزش فرض شده‌اند.

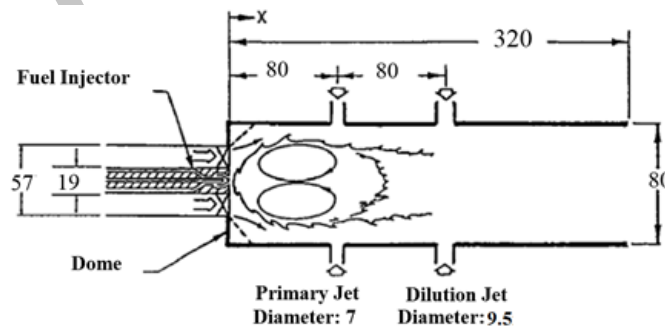


Figure 2- Schematic view of the model combustor (dimensions in mm) [11]

شکل ۲- طرحواره محفظه احتراق مدل (ابعاد میلی‌متر) [۱۱]

1. ANSYS Fluent 16.0
2. Central Difference
3. Upwind
4. Prompt  $NO_x$

جدول ۷- مشخصه‌های محفظه احتراق مدل  
Table 7- Specifications of the model combustor

Parameter	Value
Combustor's diameter (m)	0.08
Combustor's length (m)	0.32
Type of fuel	Jet - A
Operation pressure (m)	1
Swirler diameter (m)	0.019
	0.057
Swirl number	1.4
Spray angle (degree)	60

### شبکه‌بندی هندسه

جهت شبکه‌بندی محفظه احتراق مدل، از بسته نرم‌افزاری انسیس [۳۸] استفاده شده است. شبکه مورد استفاده از نوع سازمان‌یافته بوده و با توجه به اینکه در نواحی اولیه محفظه احتراق مدل، پدیده احتراق رخ می‌دهد و فواره‌های اولیه و رقیق‌سازی نیز تاثیر زیادی بر جریان می‌گذارند، در این نواحی از سلول‌های ریزتری برای شبکه‌بندی استفاده شده است. برای رسیدن به نتایج پایدار و مستقل از شبکه، از چهار اندازه شبکه مختلف برای شبیه‌سازی جریان درون محفظه استفاده شده است که شبکه‌های "Grid - A"، "Grid - B"، "Grid - C" و "Grid - D" به ترتیب دارای دویست و پنجاه هزار، پانصد هزار، هشتصد و هفتاد هزار و یک میلیون و سیصد هزار سلول محاسباتی‌اند. شکل ۳ توزیع سرعت محوری در جریان غیرواکنشی را در این چهار شبکه نشان می‌دهد. براساس شکل ۳، با توجه به دقت مناسب و هزینه کمتر شبکه "Grid - C" نسبت به سه شبکه دیگر، از شبکه "Grid - C" برای شبیه‌سازی نهایی جریان درون محفظه استفاده می‌شود. شکل ۴ شبکه نهایی مورد استفاده برای شبیه‌سازی‌ها را نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، در نواحی که گرادیان سرعت و غلظت دارای شیب تند بوده، بر تراکم سلول‌ها اضافه شده است. با توجه به استفاده از مدل آشفتگی  $k - \epsilon$  Realizable برای شبیه‌سازی جریان آشفته، تراکم سلول‌های نزدیک به دیواره‌ها و فاصله اولین سلول برحسب واحد دیواره به گونه‌ای انتخاب شده است که  $Y^+$  در محدوده ۳۰ برای اعمال توابع دیواره باشد [۳۹].

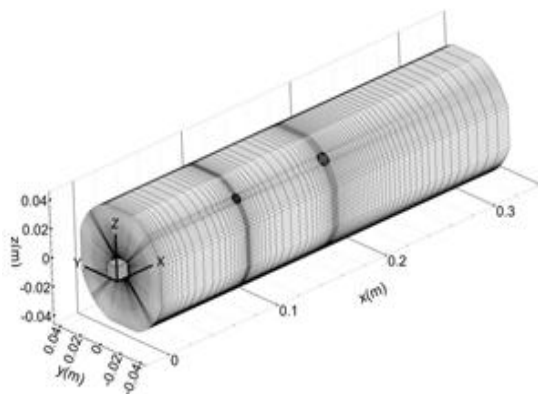


Figure 4- Structured mesh on the model combustor geometry

شکل ۴- هندسه محفظه احتراق مدل شبکه‌بندی شده

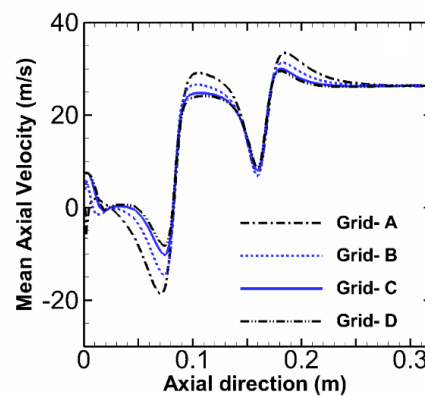


Figure 3- Grid independence test

شکل ۳- بررسی عدم وابستگی حل مسئله به تعداد سلول‌های محاسباتی

## بحث و نتایج

در این قسمت، نتایج حل عددی برای کمیت‌های فیزیکی سرعت، دما، نرخ استهلاک اسکالر شعله، کسر مخلوط و غلظت گونه‌های احتراقی در سه حالت مختلف احتراق سوخت کروسین بحث و بررسی شده‌اند. انحراف نتایج شبیه‌سازی حاضر از داده‌های تجربی توسط رابطه (۱۷) تخمین زده می‌شود.

$$MD = \frac{|\text{Experimental data} - \text{Numerical results}|}{\text{Experimental data}} \times 100 \quad (17)$$

در شکل ۵، توزیع مؤلفه محوری سرعت جریان سرد (جریان غیرواکنشی) در سه مقطع مختلف محفظه احتراق نشان داده شده است. در حل جریان سرد تنها هوا از چرخاننده و سوراخ‌های اولیه و رقیق‌سازی وارد محفظه می‌شود. نحوه توزیع سرعت و شکل ساختار جریان در داخل محفظه احتراق می‌تواند معرف توزیع مناسب جریان هوا درون محفظه و تشکیل ناحیه بازگردش در ناحیه مناسبی از آن باشد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، توزیع سرعت در جریان شبیه‌سازی شده مطابقت خوبی با داده‌های آزمایشگاهی دارد و مدل آشفتگی  $k-\epsilon$  Realizable با تقریب خوبی اختلاط جریان را پیش‌بینی کرده است. در مقطع  $X = 0.04 \text{ m}$  یک ناحیه بازگردش قوی بر روی محور مرکزی محفظه احتراق مشاهده می‌شود. با فاصله گرفتن از چرخاننده، اثر چرخش آن کمتر شده و سرعت بر روی خط مرکزی افزایش می‌یابد. با فاصله گرفتن از فواره‌های رقیق‌سازی و نزدیک شدن به خروجی محفظه احتراق، توزیع سرعت در مقطع  $X = 0.2 \text{ m}$  یکنواخت‌تر می‌شود.

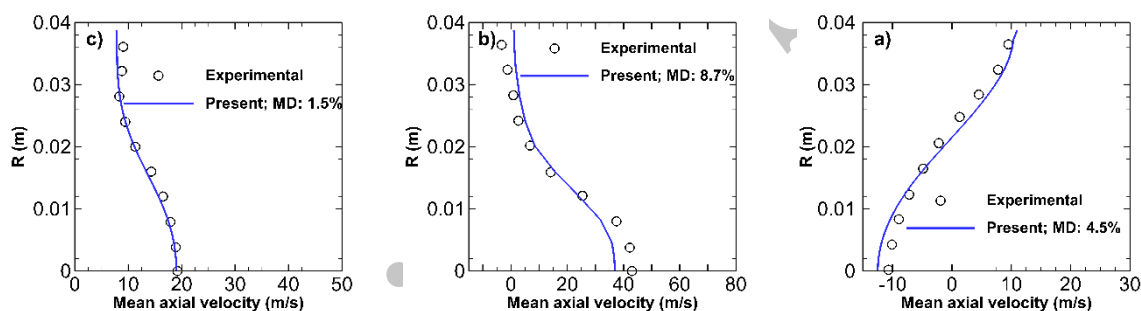


Figure 5- Comparison of present profiles of mean axial velocity (cases A to C) and experiment in a non-reactive flow [11] (a)  $X = 0.04 \text{ m}$ , (b)  $X = 0.1 \text{ m}$  and (c)  $X = 0.2 \text{ m}$

شکل ۵- مقایسه مؤلفه محوری سرعت با نتایج تجربی در جریان غیرواکنشی (الف:  $X = 0.04 \text{ m}$ ، ب:  $X = 0.1 \text{ m}$  و ج:  $X = 0.2 \text{ m}$ )

برای شبیه‌سازی جریان واکنشی از حل جریان سرد همگرا شده استفاده می‌شود. در شکل ۶، توزیع سرعت جریان واکنشی در سه مقطع طولی محفظه احتراق مدل نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، تغییر سازوکارهای سوخت بر روی سرعت جریان تاثیرگذار است. در حالتی که از سازوکار اول استفاده شده است، توزیع سرعت به داده‌های آزمایشگاهی نزدیک‌تر است. در حالتی که از سازوکار دوم استفاده شده است، بازگردش جریان بیشتری مشاهده می‌شود. در مقطع  $X = 0.1 \text{ m}$ ، با توجه به کمتر شدن اثر شعله و سازوکار شکست سوخت در این ناحیه، اختلاف بین توزیع‌های سرعت در هر سه حالت مقدار ناچیزی می‌شود. هرچند، حالت دوم کماکان نسبت به دو حالت دیگر با کمی خطای بیشتر توزیع سرعت را پیش‌بینی می‌کند. در مقطع  $X = 0.18 \text{ m}$ ، با توجه به شکل ۷ که توزیع دما در دو حالت اول و سوم شبیه به هم پیش‌بینی شده است، پیش‌بینی توزیع سرعت مشابه نیز دور از ذهن نیست، ولی توزیع سرعت پیش‌بینی شده توسط سازوکار دوم خطای بیشتری نسبت به داده‌های آزمایشگاهی دارد. کم‌تر بودن سرعت در نزدیکی محور طولی محفظه احتراق مدل ناشی از قرارگیری ناحیه بازگردش در ناحیه اولیه محفظه احتراق مدل و برهم‌کنش برخورد سوخت با هوای چرخاننده<sup>۱</sup> و فواره‌های اولیه است. در

1. Swirler

مقطع  $X = 0.1 \text{ m}$ ، به دليل قرارگيري بين فواره‌هاي اوليه و رقيق‌سازي، بر سرعت جريان افزوده مي‌شود. در مقطع  $X = 0.18 \text{ m}$  ساختار سرعت متاثر از سرعت هواي قبل از فواره‌هاي رقيق‌سازي و سرعت سوخت نيست و جريان به سمت يکنواختي پيش مي‌رود.

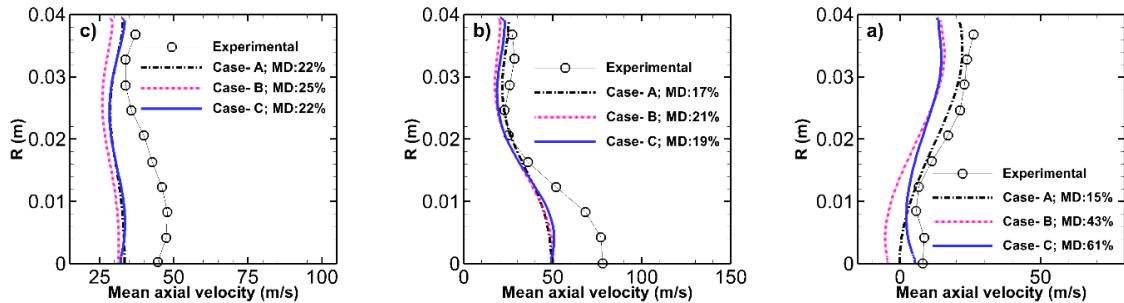


Figure 6- Comparison of present profiles of mean axial velocity (cases A to C) and experiment in reactive flow [11] (a)  $X = 0.03 \text{ m}$ , (b)  $X = 0.1 \text{ m}$  and (c)  $X = 0.18 \text{ m}$

شکل ۶- مقایسه مولفه محوری سرعت با نتایج تجربی در جریان واکنشی [۱۱]: (الف)  $X = 0.04 \text{ m}$ ، (ب)  $X = 0.1 \text{ m}$  و (ج)  $X = 0.18 \text{ m}$

در شکل ۷، تاثیر سینتیک احتراق سوخت بر توزیع دمای محفظه در سه مقطع مختلف به نمایش گذاشته شده است. بیشترین تاثیر سازوکار شکست سوخت بر پیش‌بینی توزیع دمای درون محفظه احتراق مدل، در مقطع اولیه، محل شکل‌گیری شعله مشاهده می‌شود. در ادامه، با کشیدگی شعله و خاموشی آن، روند توزیع دما در هر سه حالت به یکدیگر شبیه می‌شوند. اختلاف دمایی که در توزیع‌های دمایی بین نتایج شبیه‌سازی و داده‌های تجربی مشاهده می‌شود می‌تواند ناشی از در نظر نگرفتن انتقال حرارت جابه‌جایی باشد. زیرا که در اطراف بدنه محفظه احتراق، به گفته کامرون و همکاران، چهار مجرای ورودی آب برای خنک‌کاری بدنه وجود داشته است که به دلیل نبود اطلاعات کافی از آن صرف نظر شده است. همچنین، بنا به گفته کامرون و همکاران [۱۱]، وجود یک عدم تقارن در پاشش سوخت از سوخت‌پاش، موجب شکل‌گیری ناهمگون توزیع دمای نتایج تجربی شده است.

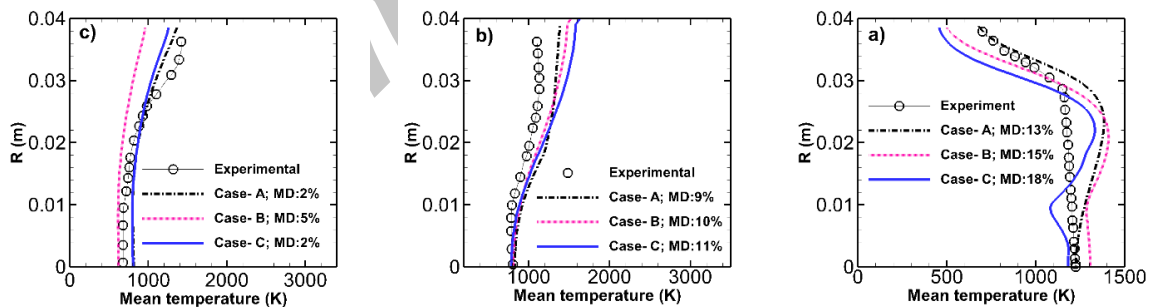


Figure 7- Comparison of present profiles of mean temperature (cases A to C) and experiment [11] (a)  $X = 0.03 \text{ m}$ , (b)  $X = 0.1 \text{ m}$  and (c)  $X = 0.18 \text{ m}$

شکل ۷- مقایسه توزیع دمای متوسط با نتایج تجربی [۱۱]: (الف)  $X = 0.03 \text{ m}$ ، (ب)  $X = 0.1 \text{ m}$  و (ج)  $X = 0.18 \text{ m}$

شکل ۸ تغییرات دمای درون محفظه احتراق روی محور طولی محفظه را نشان می‌دهد. بیشترین دما در ناحیه شکل‌گیری شعله، محل اوج واکنش‌های احتراقی و آزادسازی انرژی، رخ می‌دهد. با فاصله‌گرفتن از ناحیه ورودی محفظه، دما تحت تاثیر فواره‌های اولیه هوای سرد کاهش می‌یابد. با نفوذ هوای اولیه به مجموعه گازهای حاصل از احتراق، پیشروی واکنش‌های شیمیایی و احتراق کامل‌تر شده و دما مجدداً افزایش می‌یابد. در محل تزریق هوای سرد توسط فواره‌های رقيق‌سازي دما کاهش می‌یابد. در نهایت، دمای هوای رقيق‌سازي با دمای محصولات حاصل از احتراق به یک تعادل و ثبات می‌رسند.

پیشرفت واکنش‌ها و آزادسازی انرژی در گام‌های سازوکار سوم نسبت به دو سازوکار دیگر کندتر است. زیرا انرژی فعال‌سازی مورد نیاز برای گام‌های سازوکار سوم بیشتر است. به همین دلیل، با فاصله‌گرفتن از ناحیه شعله، که موجب کمبود انرژی مورد نیاز برای فعال‌سازی گام‌ها می‌شود، نرخ آزادسازی انرژی و افزایش دما با استفاده از سازوکار سوم نسبت به دو سازوکار دیگر کاهش می‌یابد. سازوکار اول و سازوکار سوم شباهت بسیار زیادی با یکدیگر دارند. اختلاف اصلی این دو سازوکار در تبدیل سوخت  $(C_{12}H_{23})$  به دو گونه  $C_2H_2$  و  $CH$  در سازوکار سوم و تبدیل سوخت  $(C_{12}H_{23})$  به گونه  $CH$  در سازوکار اول است. در شکل ۹، نرخ پیشرفت واکنش شکست گونه  $C_{12}H_{23}$  برای حالت‌های اول تا سوم ارائه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، شکست گونه  $C_{12}H_{23}$  در حالت اول نسبت به حالت سوم با نرخ بیشتری رخ می‌دهد. این پدیده عامل اصلی دمای بیش‌تر ناحیه شعله محفظه احتراق در استفاده از سازوکار اول نسبت به سازوکار سوم است. در حالت دوم، نرخ تجزیه  $C_{12}H_{23}$  به  $C_2H_4$  شدیدتر است، ولی در این حالت  $C_{12}H_{23}$  در ابتدا به دو گونه  $C_2H_3$  و  $C_2H_4$  و سپس  $C_2H_3$  به  $C_2H_4$  می‌شکند که همه این‌ها واکنش‌هایی گرماگیر با انرژی فعال‌سازی زیادند (جدول ۴). بنابراین، صرف انرژی در پیشروی این واکنش‌ها تا پیش از رسیدن به فرایندهای گرماده احتراق موجب کاهش دمای این سازوکار نسبت به سازوکار اول در ناحیه سوخت‌پاش می‌شود.

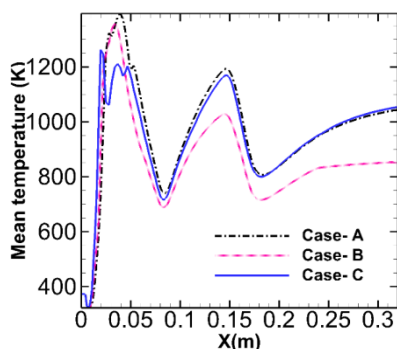


Figure 8- The mean flow temperature at centerline

شکل ۸- دمای متوسط جریان روی محور مرکزی هندسه

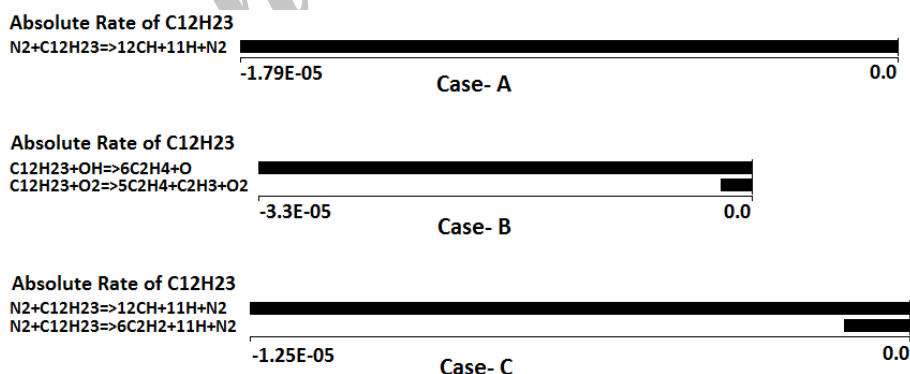


Figure 9- Decomposition rate of kerosene in each chemical mechanism

شکل ۹- نرخ تجزیه کروسین در هر یک از سازوکارهای شیمیایی

شکل ۱۰ تغییرات کسر مخلوط متوسط سوخت و هوا را روی محور طولی محفظه نشان می‌دهد. با توجه به این که کسر مخلوط کاملاً وابسته به جرم سوخت است، این متغیر تا پیش از مصرف کامل سوخت دارای مقدار است و با فاصله‌گرفتن از ناحیه شعله مقدار آن به حداقل می‌رسد. به دلیل اختلاف در نرخ پیشرفت واکنش‌های شکست  $C_{12}H_{23}$  و نرخ مصرف  $O_2$ ، مقدار

کسر مخلوط متوسط، در حالت‌های مختلف، متفاوت پیش‌بینی شده است. نرخ شکست  $C_{12}H_{23}$  به گونه‌های کوچک‌تر و مصرف  $O_2$  برای هر یک از حالت‌ها به ترتیب در شکل‌های ۹ و ۱۱ نشان داده شده است. با توجه به شکل ۱۱، حالت اول بیش‌ترین مقدار و حالت سوم کم‌ترین مقدار نرخ مصرف  $O_2$  را داراست، اما نرخ تولید  $O_2$  طی واکنش‌ها در حالت اول بیش‌ترین مقدار و در حالت دوم کم‌ترین مقدار است. زیادبودن نرخ مصرف  $C_{12}H_{23}$  منجر به کاهش سریع کسر مخلوط می‌شود، مانند حالت دوم در شکل ۱۰، اما زیاد بودن نرخ مصرف  $O_2$  منجر به تاخیر در کاهش کسر مخلوط می‌شود، مانند منحنی حالت‌های اول و سوم که در شکل ۱۰ ارائه شده است.

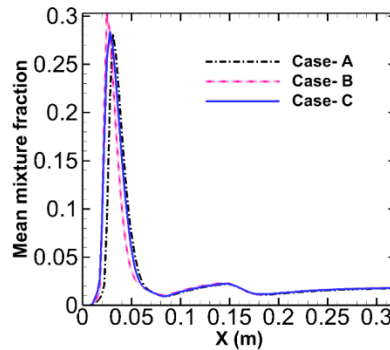


Figure 10- Mean mixture fraction on centerline

شکل ۱۰- کسر مخلوط متوسط سوخت و هوا روی محور مرکزی

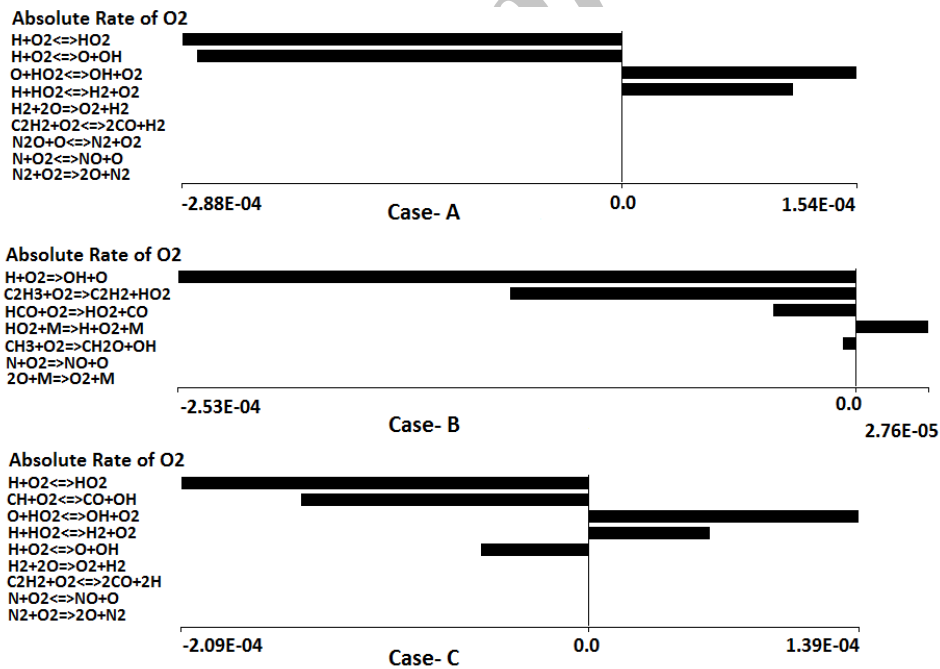


Figure 11- Production and consumption rate of oxygen in each chemical mechanism

شکل ۱۱- نرخ تولید و مصرف  $O_2$  در هر یک از سازوکارهای شیمیایی

شکل ۱۲ تغییرات نرخ استهلاک اسکالر شعله روی محور مرکزی محفظه احتراق را نشان می‌دهد. این متغیر فقط در ناحیه شعله دارای مقدار است و در سایر نواحی دارای مقدار صفر است. مقدار نرخ استهلاک اسکالر برای هر سه حالت در جبهه شعله به حداکثر می‌رسد؛ یعنی، در نقاطی که بیش‌ترین نرخ پیش‌رفت واکنش‌های شیمیایی وجود دارد. همان‌طور که مشاهده



می‌شود، نرخ استهلاک اسکالر برای حالت دوم بیش از حالت اول و برای حالت اول بیش از حالت سوم است. با توجه به معادله (۱۳)، نرخ استهلاک اسکالر تحت تاثیر دو پارامتر است که عبارت‌اند از واریانس کسر مخلوط و نسبت اضمحلال آشفته‌گی جریان به انرژی جنبشی آن. تغییرات این سه پارامتر در طول محور مرکزی محفظه احتراق مدل در شکل‌های ۱۲ و ۱۳ ارائه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نسبت اضمحلال آشفته‌گی جریان به انرژی جنبشی آن برای هر سه حالت مدل‌سازی در طول محفظه یکسان است. در حالی که تغییرات واریانس کسر مخلوط برای سه حالت اختلاف قابل توجهی دارد. الگوی تغییرات نرخ استهلاک آشفته شعله برای هر سه حالت دقیقاً مشابه الگوی تغییرات واریانس کسر مخلوط در طول محور مرکزی محفظه مدل است. به این ترتیب، می‌توان اظهار داشت اختلاف در نرخ استهلاک آشفته شعله برای سه حالت، تنها، به دلیل تفاوت واریانس کسر مخلوط آن‌هاست.

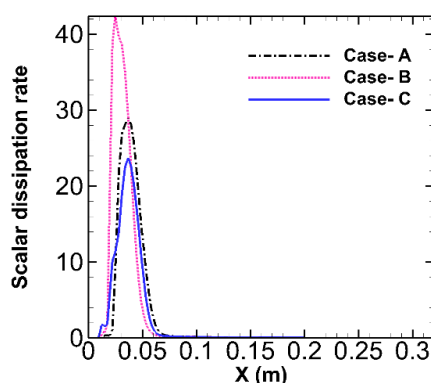


Figure 12- Turbulence scalar dissipation rate on centerline

شکل ۱۲- نرخ استهلاک اسکالر شعله روی محور مرکزی

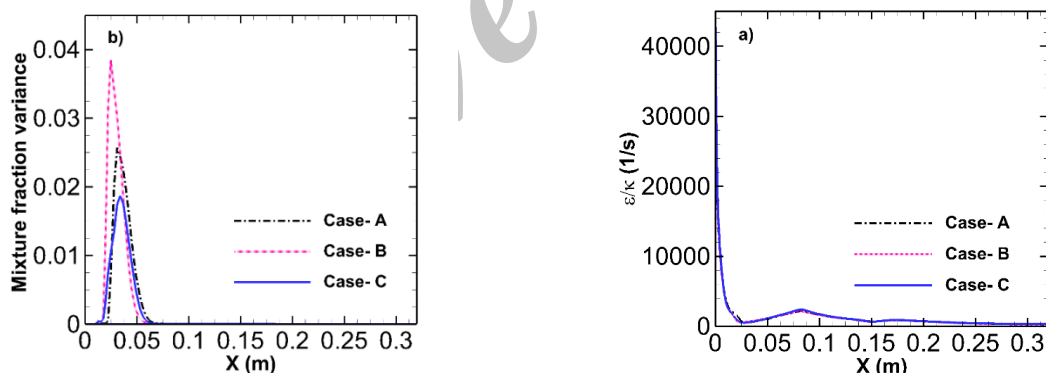


Figure 13- a) Ratio of turbulence dissipation rate to kinetic energy, b) mixture fraction variance on centerline

شکل ۱۳- الف) نسبت نرخ اضمحلال آشفته‌گی به انرژی جنبشی، ب) واریانس کسر مخلوط روی محور مرکزی هندسه

کسر مولی سوخت  $C_{12}H_{23}$  بر روی محور اصلی محفظه در شکل ۱۴ نشان داده شده است. شایان ذکر است این شکل فقط کسر مولی  $C_{12}H_{23}$  با فاز گازی را نشان می‌دهد. از این رو، شیب صعود کسر مولی سوخت از صفر تا بیشینه بیان‌گر نرخ تبخیر قطرات سوخت مایع و تبدیل شدن آن‌ها به بخار سوخت است. سوخت با ترکیب  $C_{12}H_{23}$  فقط در ناحیه ابتدایی شعله قرار دارد، زیرا  $C_{12}H_{23}$  با نزدیک شدن به ناحیه احتراق و جذب انرژی به گونه‌های زیرین تجزیه می‌شود که نرخ تجزیه آن به دما و فشار محلی درون محفظه وابسته است. در شکل ۸، مشاهده می‌شود که سه حالت در شیب صعود و نزول و مقدار بیشینه دما اختلاف زیادی با یکدیگر دارند. در حالت دوم، با توجه به این که نرخ شکست  $C_{12}H_{23}$  به گونه‌های زیرین از دو حالت دیگر بیشتر است، کسر مولی این گونه سریع‌تر افت کرده است که این موضوع با توجه به نقطه  $X = 0.04$  m در شکل قابل فهم

است. در حالت دوم، به دلیل حرارت آزاد شده بیش تر نسبت به دو حالت دیگر در ناحیه اولیه احتراق، نرخ تبخیر سوخت به شدت بالا رفته است. هرچند عمده بخار سوخت تولید شده نیز طی فاصله بسیار کمی به گونه‌های زیرین تجزیه می‌شود. در حالت‌های اول و سوم، به ترتیب، با افزایش تعادل بین نرخ تبخیر سوخت و نرخ تجزیه آن، مقدار بیشینه کسر مولی  $C_{12}H_{23}$  کاهش پیدا کرده است.

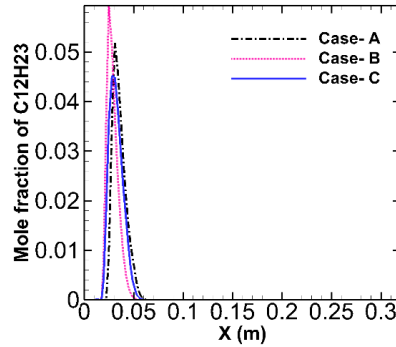


Figure 14- Mole fraction of  $C_{12}H_{23}$  on centerline

شکل ۱۴- کسر مولی گونه  $C_{12}H_{23}$  روی محور مرکزی هندسه

شکل ۱۵ تغییر کسر مولی گونه  $O_2$  را روی محور مرکزی محفظه نشان می‌دهد. منحنی تغییرات مقدار کسر مولی گونه  $O_2$  دارای دو نقطه بیشینه و دو نقطه کمینه است. کاهش اولیه مقدار کسر مولی گونه  $O_2$  و رسیدن به نقطه کمینه ناشی از ناحیه اصلی احتراق و مصرف اکسیژن طی واکنش‌هاست. با تزریق هوا از طریق فواره‌های اولیه، مقدار  $O_2$  پس از ناحیه احتراق زیاد می‌شود و دوباره، با تکامل فرایند احتراق و مصرف  $O_2$ ، مقدار این گونه تا پیش از رسیدن به فواره‌های ثانویه کاهش می‌یابد. در ناحیه فواره‌های ثانویه مقدار  $O_2$  افزایش می‌یابد و بعد از آن مقدار  $O_2$  به یک حالت تعادلی و ثابت تا انتهای محفظه می‌رسد. از مقایسه نرخ تولید و مصرف  $O_2$  در سه حالت (شکل ۱۱) مشخص می‌شود که میزان مصرف  $O_2$  در حالت دوم بیش از دو حالت دیگر است. در شکل ۱۵ نیز مشاهده می‌شود که منحنی کسر مولی  $O_2$  برای حالت دوم در اکثر نقاط پایین تر از دو منحنی دیگر است که بیانگر تطابق نتایج است. علت بیش تر مصرف شدن اکسیژن در حالت دوم تعادلی تر بودن سازوکار به کار رفته در این حالت نسبت به سازوکارهای به کار گرفته شده در دو حالت دیگر است، زیرا در شعله تعادلی سوخت و اکسیژن بیشتری مصرف می‌شوند. با توجه به جدول ۶، بیشترین مقدار نرخ استهلاک اسکالر آرام حاصل شده برای حالت دوم ۰/۰۱ است که در مقابل نرخ استهلاک اسکالر آرام دو حالت دیگر ناچیز است. از این رو، می‌توان اظهار داشت سازوکار شیمیایی دوم یک سازوکار تعادلی تر نسبت به دو سازوکار دیگر است.

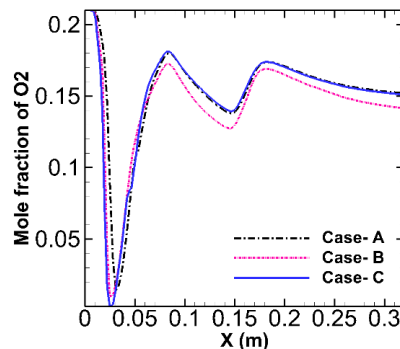


Figure 15- Mole fraction of  $O_2$  on centerline

شکل ۱۵- کسر مولی گونه  $O_2$  روی محور مرکزی

در شکل ۱۶، به مقایسه میزان کسر مولی گونه H برحسب کسر مولی گونه H<sub>2</sub>O روی محور مرکزی هندسه پرداخته شده است. اهمیت اصلی این شکل در تعیین میزان تولید H نسبت به H<sub>2</sub>O است، چرا که مولکولهای H<sub>2</sub>O تحت تاثیر شرایط دمایی دچار شکست شده و به اتمهای H تبدیل می‌شوند. برعکس این پدیده، یعنی ترکیب اتمهای H و تشکیل بخار آب، نیز به وفور رخ می‌دهد. در این شکل، مشاهده می‌شود که مقدار H به ازای H<sub>2</sub>O حین استفاده از سازوکار دوم بسیار ناچیز است. دلیل این موضوع وجود واکنش‌های (۱۷) و (۱۸) در سازوکار دوم است که منجر به تبدیل عمده H به H<sub>2</sub>O می‌شود.



در حالی که در سازوکارهای اول و سوم تحت تاثیر وجود واکنش‌های موجود در جدول ۸ مقدار اتم هیدروژن و بخار آب موجود تقریباً همواره همگام بوده است. اما، همچنان، اختلاف بین منحنی‌های این دو سازوکار مشاهده می‌شود. علت این پدیده تفاوت در مقدار انرژی فعال‌سازی و ضریب فرکانسی برای این واکنش در دو سازوکار است که در جدول ۸ نشان داده شده است. در کل، می‌توان می‌گفت کاهش مقدار انرژی فعال‌سازی منجر به افزایش هرچه بیشتر پیشرفت واکنش می‌شود.

جدول ۸- مقایسه ثوابت رابطه آرنیوس در سازوکار شیمیایی اول و سوم

Table 10- Compare the constants Arrhenius relationship in the first and third chemical Mechanisms

First chemical mechanism	H <sub>2</sub> + OH <=> H <sub>2</sub> O + H	2.16E + 08	1.5	3430
Third chemical mechanism	H <sub>2</sub> + OH <=> H <sub>2</sub> O + H	1.17E + 11	1.1	3626

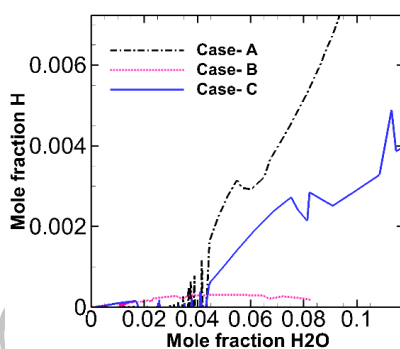


Figure 16- Compare the mole fraction of H as function of mole fraction of H<sub>2</sub>O on centerline  
شکل ۱۶- مقایسه کسر مولی گونه H برحسب کسر مولی گونه H<sub>2</sub>O روی محور مرکزی هندسه

شکل ۱۷ دمای متوسط محفظه احتراق مدل برحسب کسر جرمی گونه بخار آب را نشان می‌دهد. همان‌طور که از منحنی‌ها پیدا است، بیش‌ترین غلظت H<sub>2</sub>O در مکانی است که دما بیشینه است، زیرا بخار آب اصلی‌ترین محصول احتراق کامل است.

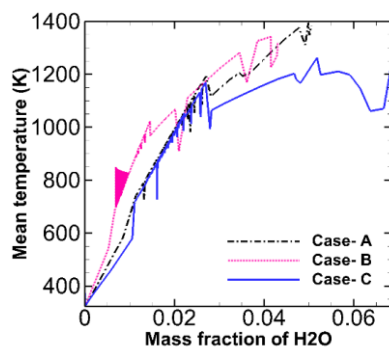


Figure 17- The mean temperature of the model combustor as function of mass fraction of H<sub>2</sub>O  
شکل ۱۷- دمای متوسط محفظه احتراق مدل برحسب کسر جرمی گونه H<sub>2</sub>O

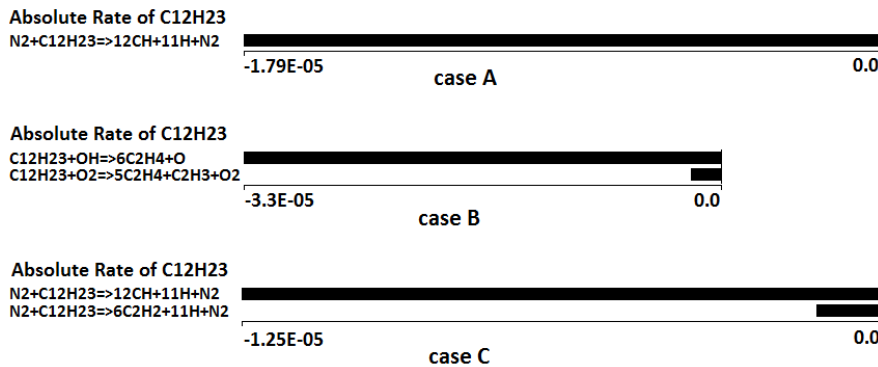


Figure 18- Production and consumption rate of H<sub>2</sub>O in each chemical mechanism

شکل ۱۸- نرخ تولید و مصرف گونه H<sub>2</sub>O در هر یک از سازوکارهای شیمیایی

از مقایسه شیب منحنی‌های شکل ۱۷ و مقادیر موجود در شکل ۱۸، می‌توان دریافت که نرخ تولید بخار آب برای حالت دوم بیش از حالت اول و برای حالت اول بیش از حالت سوم است. البته شایان ذکر است مقدار نهایی هر گونه تقریباً مستقل از نرخ تولید آن است، چرا که نرخ تولید در همه نقاط محفظه یکسان نیست و حتی در برخی نواحی واکنش بازگشتی داریم و گونه‌هایی مثل بخار آب تجزیه می‌شوند.

شکل ۱۹ کسر مولی گونه‌های CO<sub>2</sub> و O<sub>2</sub> و شکل ۲۰ دمای متوسط محفظه احتراق مدل را در هر کسر مخلوط نشان می‌دهد. اطلاعات این دو شکل از جبهه شعله خاموش‌شونده (جبهه شعله با بیشترین نرخ استهلاک اسکالر آرام) در هر یک از سازوکارها استخراج شده است. میزان غلظت CO<sub>2</sub> رابطه مستقیم با دمای محفظه احتراق دارد. یعنی، هرچه قدر میزان CO<sub>2</sub> بیشتر باشد، قطعاً دمای محفظه بالاتر خواهد بود و احتراق سوخت کامل‌تر انجام شده است، در حالی که میزان O<sub>2</sub> رابطه معکوس با دمای محفظه و تکامل احتراق دارد. با توجه به شکل، مشخص است که میزان CO<sub>2</sub> در هر کسر مخلوط برای حالت دوم با اختلاف زیادی بیش از حالت‌های اول و سوم است. ولی فزونی CO<sub>2</sub> برای حالت اول نسبت به حالت سوم فقط تا کسر مخلوط استوکیومتری برقرار است.

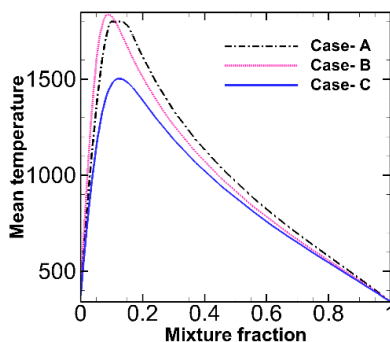


Figure 20- The mean temperature of the model combustor as function of mixture fraction at the last scalar dissipation

شکل ۲۰- دمای متوسط محفظه احتراق مدل برحسب کسر مخلوط در نرخ استهلاک اسکالر نهایی

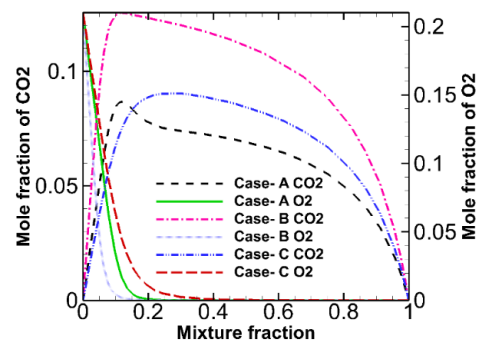


Figure 19- The mole fraction of CO<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> species as function of mixture fraction

شکل ۱۹- مقادیر کسر مولی گونه‌های CO<sub>2</sub> و O<sub>2</sub> برحسب کسر مخلوط

به‌همین ترتیب، مطابق با شکل ۲۰، دمای محفظه برای حالت دوم بیش از حالت اول و برای حالت اول بیش از حالت سوم است. زیرا سازوکار دوم، با کمترین نرخ استهلاک اسکالر شعله، با توجه به جدول ۶ بیش‌ترین شباهت را به احتراق تعادلی و استوکیومتری داشته است و سازوکار سوم، با بیش‌ترین نرخ استهلاک اسکالر، کم‌ترین شباهت را داشته است. در بخش‌هایی که کسر مخلوط بیش از مقدار استوکیومتری است، به‌دلیل فزونی مقدار سوخت نسبت به هوای موجود، شعله دچار کمبود هوا

و خفگی شده و مقدار  $CO_2$  برای سه حالت کاهش یافته است. در هر کسر مخلوط، مستقل از میزان استوکیومتری آن، میزان  $O_2$  برای حالت دوم کمتر از دو حالت دیگر است. این نشان از مصرف بیش تر اکسیژن در حالت دوم نسبت به دو حالت دیگر است. دلیل این پدیده نرخ استهلاک اسکالر کمتر در سازوکار دوم است (جدول ۶). چنین ارتباطی نیز بین نرخ استهلاک اسکالر و کاستی مقدار  $O_2$  در حالت اول نسبت به حالت سوم وجود دارد.

در شکل ۲۱، دمای متوسط محفظه احتراق مدل برحسب کسر مخلوط در نرخ استهلاک اسکالر ۰/۰۱ برای شعله آرام در هر سه حالت نشان داده شده است. شایان ذکر است مقادیر دمای ارائه شده در این شکل پیش از اعمال اثرات آشفستگی جریان بر شعله است و فقط برای مقایسه جبهه شعله ساخته شده در سه حالت است. در شکل ۸، اختلاف دمای کمی برای جریان سه سازوکار به کاررفته در شبیه سازی احتراق مشاهده می شود. اما، در شکل ۲۱، توزیع دما برحسب مقادیر مختلف کسر مخلوط، برای سه حالت مزبور، اختلاف قابل ملاحظه ای دارند. توزیع متفاوت دما در شکل های ۸ و ۲۱ بیان گر نقش موثر و دوطرفه بین آشفستگی جریان و جبهه شعله است. شکل ۲۲ مقادیر آلاینده نیتریک اکسید روی محور مرکزی محفظه احتراق مدل را نشان می دهد. هدف اصلی این شکل مقایسه میزان  $NO$  تولید شده تحت تاثیر سازوکارهای شیمیایی مختلف در مدل سازی احتراق مدل است. همان طور که مشاهده می شود، میزان  $NO$  تولید شده در ناحیه شعله برای حالت اول بیش از دو حالت دیگر است که در درجه اول ناشی از دمای شعله بالاتر در حالت مذکور است. این در حالی است که واکنش های بازگشتی در این ناحیه و نواحی بعدی نقش بسزایی ایفا می کنند، به طوری که تا انتهای محفظه مقدار  $NO$  به تعادل می رسد و برای حالت سوم به بیش از حالت اول می رسد. اما، در بحث حالت دوم و اختلاف چشم گیر مقدار مونو اکسید نیتروژن تولید شده در آن نسبت به دو حالت دیگر، باید گفت که علت اصلی این موضوع تفاوت جدی در سازوکارها، به ویژه بخش واکنش های گونه نیتروژن است. برای مثال، می توان به گونه های میانی  $NH$  و  $N_2O$  اشاره کرد که در سازوکار دوم استفاده نشده است.

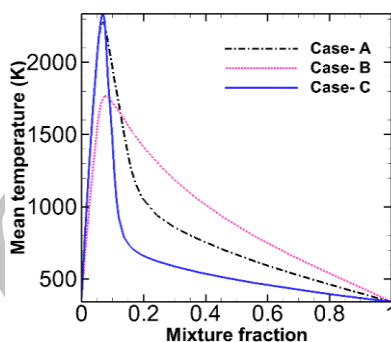


Figure 21- The mean temperature of the model combustor as function of mixture fraction at the 0.01 scalar dissipation on laminar flamelet

شکل ۲۱- دمای متوسط محفظه احتراق مدل برحسب کسر مخلوط در نرخ استهلاک اسکالر ۰/۰۱ برای شعله آرام

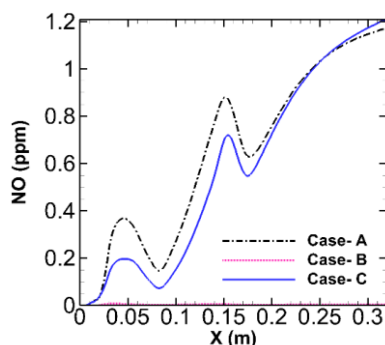


Figure 22- Nitric oxide emission levels on central axis of the model combustor

شکل ۲۲- مقادیر آلاینده نیتریک اکسید روی محور مرکزی محفظه احتراق مدل

## نتيجه گيري

در مقاله حاضر، تأثير سازوکار شيميايي احتراق بر سرعت، دما، کسر مخلوط، نرخ استهلاك اسکالر شعله، غلظت گونه‌هاي احتراقي و ميزان آلاينده نيتروژن اکسيد در يک محفظه احتراق مدل تحليل و بررسي شده است. با توجه به اينکه سازوکار شيميايي احتراق تأثير بسياري بر شکل گيري ساختار جريان واکنشي درون محفظه احتراق دارد و ميزان پيشروي در هر يک از گام‌هاي سازوکار کاملاً وابسته به فشار و دماي لحظه‌اي درون محفظه احتراق است، نتايج زير از مقايسه مباحث حاصل شده است.

۱. با توجه به مقايسه نتايج سرعت و دماي استخراج شده از مدل سازي‌هاي جريان واکنشي با داده‌هاي آزمايشگاهي، نتايج حاصل از به کارگيري سازوکار شيميايي اول، که شامل ۱۷ گونه شيميايي و ۲۶ گام واکنشي است، از دقت بيشتري برخوردار بوده و به داده‌هاي آزمايشگاهي نزديک تر است. از طرفي، سازوکار شيميايي دوم، که يک سازوکار نسبتاً تعادلي است و بيشينه نرخ استهلاك اسکالر آرام آن ۰/۰۱ (کمترين مقدار نسبت به دو سازوکار ديگر) است، کمترين دقت را در ارائه نتايج به همراه دارد.

۲. به دليل اختلاف در نرخ پيشرفت واکنش‌هاي شکست  $C_{12}H_{23}$  و نرخ مصرف  $O_2$ ، مقدار کسر مخلوط متوسط، در حالت‌هاي مختلف، متفاوت پيش بيني مي‌شود. زيادبودن نرخ مصرف  $C_{12}H_{23}$  منجر به کاهش سريع کسر مخلوط مي‌شود، در حالي که زيادبودن نرخ مصرف  $O_2$  منجر به تاخير در کاهش کسر مخلوط مي‌شود.

۳. مقدار نرخ استهلاك اسکالر براي هر سه حالت در جبهه شعله به حداکثر مي‌رسد؛ يعني، در نقاطي که بيشترين نرخ پيشرفت واکنش‌هاي شيميايي وجود دارد. با توجه به يکسانبودن نسبت اضمحلال آشفته جريان به انرژي جنبشي آن براي هر سه حالت مدل سازي، اختلاف در نرخ استهلاك آشفته شعله براي سه حالت، تنها، به دليل تفاوت واريانس کسر مخلوط آن هاست.

۴. سوخت  $C_{12}H_{23}$  با نزديک شدن به ناحيه احتراق و جذب انرژي به گونه‌هاي زيرين تجزيه مي‌شود که نرخ تجزيه آن به دما و فشار محلي درون محفظه وابسته است، به ويژه که شيب صعود و نزول و مقدار بيشينه دما در سه حالت اختلاف زيادي با يکديگر دارند. اين موضوع عامل اصلي اختلاف در نرخ تجزيه  $C_{12}H_{23}$  سازوکارهاست.

۵. در هر کسر مخلوط، مستقل از ميزان استوکیومتری آن، ميزان  $O_2$  براي حالت دوم کمتر از دو حالت ديگر است. اين نشان از مصرف بيشتر اکسيژن در حالت دوم نسبت به دو حالت ديگر است. دليل اين پديده نرخ استهلاك اسکالر آرام کمتر در فليمات ساخته شده براي حالت دوم است. چنين ارتباطي نيز بين نرخ استهلاك اسکالر و کاستي مقدار  $O_2$  در حالت اول نسبت به حالت سوم وجود دارد.

۶. فزوني  $CO_2$  براي حالت اول نسبت به حالت سوم فقط تا کسر مخلوط استوکیومتری برقرار است. به همين ترتيب، دماي متوسط محفظه احتراق مدل برحسب کسر مخلوط در نرخ استهلاك اسکالر نهايي براي حالت دوم بيش از حالت اول و براي حالت اول بيش از حالت سوم است. زيرا، فليمات ساخته شده براي سازوکار دوم با کمترين نرخ استهلاك اسکالر شعله بيشترين شباهت را به احتراق تعادلي و استوکیومتری داشته است و سازوکار سوم با بيش ترين نرخ استهلاك اسکالر کمترين شباهت را داشته است.

۷. اختلاف دماي کمی براي دماي متوسط جريان روی محور مرکزی هندسه طی سه سازوکار به کار رفته در شبیه سازی احتراق مشاهده می‌شود، اما دماي متوسط محفظه احتراق مدل برحسب کسر مخلوط در نرخ استهلاك اسکالر ۰/۰۱ براي شعله آرام، اختلاف قابل ملاحظه‌اي دارد. توزيع متفاوت دما در اين حالت‌ها بيان گر نقش موثر و دوطرفه بين آشفته جريان و جبهه شعله است.

۸. میزان NO تولیدشده در ناحیه شعله برای حالت اول بیش از دو حالت دیگر است که در درجه اول ناشی از دمای شعله بالاتر در حالت مذکور است. این در حالی است که واکنش‌های بازگشتی در این ناحیه و نواحی بعدی نقش بسزایی ایفا می‌کنند، به طوری که تا انتهای محفظه مقدار NO به تعادل می‌رسد و برای حالت سوم به بیش از حالت اول می‌رسد.

## منابع

1. A. Mardani and A. Fazlollahi-Ghomshi, "Numerical Investigation of a Double-Swirled Gas Turbine Model Combustor using a RANS Approach with Different Turbulence-Chemistry Interaction Models," *Energy & Fuels*, 30, No. 8, 2016, pp. 6764-6776.
2. T. Kitano, J. Nishio, R. Kurose and S. Komori, "Evaporation and Combustion of Multicomponent Fuel Droplets," *Fuel*, 136, 2014, pp. 219-225.
3. N. Zettervall, C. Fureby and E. J. K. Nilsson, "Small Skeletal Kinetic Mechanism for Kerosene Combustion," *Energy & Fuels*, 30, No. 11, 2016, pp. 9801-9813.
4. H. Zeinivand and F. Bazdidi-Tehrani, "Influence of Stabilizer Jets on Combustion Characteristics and NOx Emission in a Jet-Stabilized Combustor," *Applied Energy*, 92, 2012, pp. 348-360.
5. F. Bazdidi-Tehrani and H. Zeinivand, "Presumed PDF Modeling of Reactive Two-phase Flow in a Three Dimensional Jet-Stabilized Model Combustor," *Energy Conversion and Management*, 51, 2010, pp. 225-234.
6. S. Honnet, K. Seshadri, U. Niemann and N. Peters, "A Surrogate Fuel for Kerosene," *Proc. Combust. Inst.*, 32, No. 1, 2009, pp. 485-492.
7. H. Wen Ge and E. Gutheil, "Simulation of a Turbulent Spray Flame using Coupled PDF Gas Phase and Spray Flamelet Modeling," *Combustion and Flame*, 153, 2008, pp. 173-185.
8. P. Dagaut, M. Reuillon, J. C. Boettner and M. Cathonnet, "Kerosene Combustion at Pressures up to 40 atm: Experimental Study and Detailed Chemical Kinetic Modeling," *Symposium (International) on Combustion*, 25, No. 1, 1994, pp. 919-926.
9. P. Dagaut and S. Ga, "Chemical Kinetic Study of the Effect of a Biofuel Additive on Jet-A1 Combustion," *Journal of Physical Chemistry A*, 111, No. 19, 2007, pp. 3992-4000.
10. P. Dagaut, A. El Bakali and A. Ristori, "The Combustion of Kerosene: Experimental Results and Kinetic Modelling using 1- to 3-Component Surrogate Model Fuels," *Fuel*, 85, 2006, pp. 944-956.
11. C. D. Cameron, J. Brouwer, C. P. Wood and G. S. Samuelsen, "A Detailed Characterization of the Velocity and Thermal Fields in a Model Can Combustor with Wall Jet Injection," *Gas Turbine Power*, 111, 1989, pp. 31-35.
12. C. D. Richards and G. S. Samuelsen, "The Role of Primary Jets in the Dome Region Aerodynamics of a Model Can Combustor," *Gas Turbine Power*, 114, 1992, pp. 20-26.
13. C. D. Cameron, J. Brouwer and G. S. Samuelsen, "A Model Gas Turbine Combustor with Wall Jets and Optical Access for Turbulent Mixing Fuel Effects and Spray," *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, Combustion Institute, Pittsburgh, PA (U.S.), 1988, pp. 465-474.
14. ANSYS FLUENT User's Manual, Version 15.0, 2013.
15. S. S. Sazhin, "Advanced Models of Fuel Droplet Heating and Evaporation," *Progress in Energy and Combustion Science*, 32, 2006, pp. 162-214.
16. A. Berlemont, M. S. Granicher and G. Gouesbet, "Heat and Mass Transfer Coupling between Vaporizing Droplets and Turbulence using a Lagrangian Approach," *Heat and Mass Transfer*, 38, 1995, pp. 3023-3034.
17. J. H. Park, Y. Yoon and S. S. Hwang, "Improved Tab-Model for Prediction of Spray Droplet Deformation and Breakup," *Atomization and Sprays*, 12, 2002, pp. 387-402.
18. A. H. Lefebvre and D. R. Ballal, *Gas Turbine Combustion, Alternative Fuels and Emissions*, 3rd Edition, CRC Press, Taylor & Francis Group, U. S., 2010.
19. Swedish Industrial Association for Multiphase Flows (SIAMUF) and M. Sommerfeld, *Best Practice Guidelines for Computational Fluid Dynamics of Dispersed Multi-Phase Flows*, European Research Community on Flow, Turbulence and Combustion (ERCOFTAC), ISBN 978-91-633-3564-8, 2008.
20. G. M. Faeth, "Evaporation and Combustion of Sprays," *Progress in Energy and Combustion Science*, 9, 1983, pp. 1-76.
21. T. H. Shih, W. W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang and J. Zhu, "A New k-ε Eddy Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows-Model Development and Validation," *Computers Fluids*, 24, No. 3, 1995, pp. 227-238.
22. D. Veynante and L. Vervisch, "Turbulent Combustion Modeling," *Energy Combustion*, 28, 2002, pp. 193-266.
23. H. Pitsch and N. Peters, "A Consistent Flame Let Formulation for Non-premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects," *Combustion and Flame*, 114, 1998, pp. 26-40.
24. N. Peters, *Turbulent Combustion*, UK, Cambridge University Press, 2000.
25. K. Claramunt, *Numerical Simulation of Non-Premixed Laminar and Turbulent Flames by Means of Flamelet Modeling Approaches*, PhD Thesis, Department of Heat Engines, Universitat Politècnica de Catalunya, 2005.
26. F. Chitgarha, M. Davazdah Emami and M. Farschi, "Simulation of a CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> Diffusion Flame using Unsteady and Steady Flamelet Combustion Models," *Fuel and Combustion Journal*, 8, No. 2, 2015, pp. 71-84. (In Persian)
27. F. Chitgarha, *Modelling and Simulation of Flame Behavior by using Steady and Unsteady Flame Let Combustion*

- Models*, MS Thesis, Department of Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan, 2012. (In Persian)
28. F. Bazdidi-Tehrani, H. Yazdani-Ahmadabadi and M. S. Abedinejad, "Analysis of Influence of Variable Airflow Distribution on Reactive Flow in a Gas Turbine Model Combustion Chamber," *Fuel and Combustion Journal*, 8, No. 2, 2015, pp. 13-32. (In Persian)
  29. M. R. Wright, *An Introduction to Chemical Kinetics*, Vol. 8, John Wiley & Sons, U. K, 2004.
  30. K. Kundu, P. Penko and S. Yang, "Simplified Jet-A/Air Combustion Mechanisms for Calculation of NO<sub>x</sub> Emissions," *29th Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Cleveland, OH, USA, 1993.
  31. D. Mavris, *Enhanced Emission Prediction Modeling and Analysis for Conceptual Design*, Final Report for NASA grant NNX07AO08A 17, 2010.
  32. M. Molnar and C. J. Marek, "Reduced Equations for Calculating the Combustion Rates of Jet-A and Methane Fuel," NASA Technical Reports Server (NTRS), No. NASA/TM-2003-212702, E-14205, NAS 1.15:212702, November, 2003.
  33. T. F. Smith, Z. F. Shen and J. N. Friedman, "Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Model," *Heat Transfer*, 104, 1982, pp. 602-608.
  34. M. F. Modest, *Radiative Heat Transfer*, Third Edition, Academic Press, U. S, 2013.
  35. Y. B. Zeldovich, P. Y. Sadovnikov and D. A. Frank-Kamenetskii, *Oxidation of Nitrogen in Combustion*, Publishing House of the Acad of Sciences of USSR, 1947.
  36. C. Westbrook and F. Dryer, "Chemical Kinetic Modelling of Hydrocarbon Combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, 10, 1984, pp. 1-57.
  37. De Soete, "Overall Reaction Rates of NO and N<sub>2</sub> Formation from Fuel Nitrogen," *Symposium (international) on Combustion*, 15, Toshi Center Hall Tokyo, Japan, 1975, pp. 1093-1102.
  38. ANSYS ICEM CFD Tutorial Manual, Version 11.0, 2007.
  39. L. Davidson, *Fluid Mechanics, Turbulent Flow and Turbulence Modeling*, Chalmers University of Technology, Sweden, 2011.

## English Abstract

# Influence of Chemical Reaction Mechanisms on the Combustion Characteristics in a gas turbine model combustor

Farzad Bazdidi-Tehrani, Sajad Mirzaei and Mohammad Sadegh Abedinejad

Heat Transfer Research Laboratory, School of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran.

(Received: 2016.12.5, Received in revised form: 2017.3.9, Accepted: 2017.3.13)

The purpose of the present paper is to investigate the influence of different chemical mechanisms on non-premixed combustion of Kerosene liquid fuel in a gas turbine model combustor. Numerical simulations of two-phase reacting flow in this combustor is performed by Realizable k- $\epsilon$  turbulence model, Steady Laminar flamelet combustion model, and Discrete Ordinates radiation model in a structured finite volume mesh. An Eulerian-Lagrangian approach is applied to model droplet spray of liquid fuel. The results in the present paper are obtained using three different chemical reaction mechanisms for Kerosene and the boundary conditions in the three cases are based on the experimental conditions. Validation of the results are performed by comparing the velocity and temperature distributions with the available experimental data. Accordingly, the results obtained by the first chemical reaction mechanism, which consists of 17 species and 26 reactions, are more accurate and closer to the experimental data. Comparisons of the mean velocity and temperature distributions with available experimental data are one of the outputs of the present paper. Also, the quantity of scalar dissipation rate, mixture fraction, mass fraction and the rate of formation of carbon dioxide, water vapor, Kerosene and nitric oxide are compared for the three different chemical reaction mechanisms. The results show that because of differences in the decomposition rate of C<sub>12</sub>H<sub>23</sub> and consumption rate of O<sub>2</sub>, average mixture fraction in the chemical mechanisms are different. In addition, the scalar dissipation rate of the flame is affected by the turbulent flow in the three mechanisms. Further, the concentration of produced NO and CO<sub>2</sub> in the flame region using the three mechanisms are different due to the flame temperature differences.

**Keywords:** Gas Turbine Model Combustor, Chemical Mechanism, Kerosene, Reaction-Turbulent Flow, Flamelet